



HAL
open science

Correspondance entre régression par processus Gaussien et splines d'interpolation sous contraintes linéaires de type inégalité. Théorie et applications.

Hassan Maatouk

► **To cite this version:**

Hassan Maatouk. Correspondance entre régression par processus Gaussien et splines d'interpolation sous contraintes linéaires de type inégalité. Théorie et applications.. Autre. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2015. Français. NNT : 2015EMSE0791 . tel-01282224

HAL Id: tel-01282224

<https://theses.hal.science/tel-01282224>

Submitted on 3 Mar 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



NNT : 2015 EMSE 0791

THÈSE

présentée par

Hassan MAATOUK

pour obtenir le grade de
Docteur de l'École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne
Spécialité : Mathématiques Appliquées

CORRESPONDANCE ENTRE RÉGRESSION PAR PROCESSUS
GAUSSIEN ET SPLINES D'INTERPOLATION SOUS CONTRAINTES
LINÉAIRES DE TYPE INÉGALITÉ. THÉORIE ET APPLICATIONS

soutenue à Saint-Étienne, le 1^{er} Octobre 2015

Membres du jury

Président :	Sophie DABO-NIANG	Professeur, Université Lille 3
Rapporteurs :	Fabrice GAMBOA	Professeur, Université Toulouse 3
	Christine THOMAS-AGNAN	Professeur, Université Toulouse 1
Examineurs :	Denis ALLARD	Directeur de recherche, INRA, Avignon
Directeurs de thèse :	Olivier ROUSTANT	Professeur agrégé, Mines de St-Étienne
	Laurence GRAMMONT	Maître de Conférences HDR, ICJ Lyon 1
Co-encadrants :	Xavier BAY	Maître de Conférences agrégé, Mines de St-Étienne
	Yann RICHEL	Ingénieur docteur, IRSN, Paris

Spécialités doctorales	Responsables :	Spécialités doctorales	Responsables
SCIENCES ET GENIE DES MATERIAUX	K. Wolski Directeur de recherche	MATHEMATIQUES APPLIQUEES	O. Roustant, Maître-assistant
MECANIQUE ET INGENIERIE	S. Drapier, professeur	INFORMATIQUE	O. Boissier, Professeur
GENIE DES PROCEDES	F. Gruy, Maître de recherche	IMAGE, VISION, SIGNAL	JC. Pinoli, Professeur
SCIENCES DE LA TERRE	B. Guy, Directeur de recherche	GENIE INDUSTRIEL	A. Dolgui, Professeur
SCIENCES ET GENIE DE L'ENVIRONNEMENT	D. Grailot, Directeur de recherche	MICROELECTRONIQUE	S. Dauzere Peres, Professeur

EMSE : Enseignants-chercheurs et chercheurs autorisés à diriger des thèses de doctorat (titulaires d'un doctorat d'État ou d'une HDR)

ABSI	Nabil	CR	Génie industriel	CMP
AVRIL	Stéphane	PR2	Mécanique et ingénierie	CIS
BALBO	Flavien	PR2	Informatique	FAYOL
BASSEREAU	Jean-François	PR	Sciences et génie des matériaux	SMS
BATTAIA-GUSCHINSKAYA	Olga	CR		FAYOL
BATTON-HUBERT	Mireille	PR2	Sciences et génie de l'environnement	FAYOL
BERGER DOUCE	Sandrine	PR2	Sciences de gestion	FAYOL
BIGOT	Jean Pierre	MR(DR2)	Génie des Procédés	SPIN
BILAL	Essaid	DR	Sciences de la Terre	SPIN
BLAYAC	Sylvain	MA(MDC)	Microélectronique	CMP
BOISSIER	Olivier	PR1	Informatique	FAYOL
BONNEFOY	Olivier	MA(MDC)	Génie des Procédés	SPIN
BORBELY	Andras	MR(DR2)	Sciences et génie des matériaux	SMS
BOUCHER	Xavier	PR2	Génie Industriel	FAYOL
BRODHAG	Christian	DR	Sciences et génie de l'environnement	FAYOL
BRUCHON	Julien	MA(MDC)	Mécanique et ingénierie	SMS
BURLAT	Patrick	PR1	Génie Industriel	FAYOL
COURNIL	Michel	PR0	Génie des Procédés	DIR
DARRIEULAT	Michel	IGM	Sciences et génie des matériaux	SMS
DAUZERE-PERES	Stéphane	PR1	Génie Industriel	CMP
DEBAYLE	Johan	CR	Image Vision Signal	CIS
DELAFOSSSE	David	PR0	Sciences et génie des matériaux	SMS
DELORME	Xavier	MA(MDC)		FAYOL
DESRAYAUD	Christophe	PR1	Mécanique et ingénierie	SMS
DOLGUI	Alexandre	PR0	Génie Industriel	FAYOL
DRAPIER	Sylvain	PR1	Mécanique et ingénierie	SMS
FAVERGEON	Loïc	CR	Génie des Procédés	SPIN
FEILLET	Dominique	PR1	Génie Industriel	CMP
FRACZKIEWICZ	Anna	DR	Sciences et génie des matériaux	SMS
GARCIA	Daniel	MR(DR2)	Génie des Procédés	SPIN
GAVET	Yann	MA(MDC)	Image Vision Signal	CIS
GERINGER	Jean	MA(MDC)	Sciences et génie des matériaux	CIS
GOEURIOT	Dominique	DR	Sciences et génie des matériaux	SMS
GRAILLOT	Didier	DR	Sciences et génie de l'environnement	SPIN
GROSSEAU	Philippe	DR	Génie des Procédés	SPIN
GRUY	Frédéric	PR1	Génie des Procédés	SPIN
GUY	Bernard	DR	Sciences de la Terre	SPIN
HAN	Woo-Suck	MR	Mécanique et ingénierie	SMS
HERRI	Jean Michel	PR1	Génie des Procédés	SPIN
KERMOUCHE	Guillaume	PR2	Mécanique et Ingénierie	SMS
KLOCKER	Helmut	DR	Sciences et génie des matériaux	SMS
LAFOREST	Valérie	MR(DR2)	Sciences et génie de l'environnement	FAYOL
LERICHE	Rodolphe	CR	Mécanique et ingénierie	FAYOL
LI	Jean-Michel		Microélectronique	CMP
MALLIARAS	Georges	PR1	Microélectronique	CMP
MAURINE	Philippe	Ingénieur de recherche		CMP
MOLIMARD	Jérôme	PR2	Mécanique et ingénierie	CIS
MONTHEILLET	Frank	DR	Sciences et génie des matériaux	SMS
MOUTTE	Jacques	CR	Génie des Procédés	SPIN
NEUBERT	Gilles	PR		FAYOL
NIKOLOVSKI	Jean-Pierre	Ingénieur de recherche		CMP
NORTIER	Patrice	PR1		SPIN
OWENS	Rosin	MA(MDC)		CMP
PICARD	Gauthier	MA(MDC)		FAYOL
PIJOLAT	Christophe	PR0	Génie des Procédés	SPIN
PIJOLAT	Michèle	PR1	Génie des Procédés	SPIN
PINOLI	Jean Charles	PR0	Image Vision Signal	CIS
POURCHEZ	Jérémy	MR	Génie des Procédés	CIS
ROBISSON	Bruno	Ingénieur de recherche		CMP
ROUSSY	Agnès	MA(MDC)	Génie industriel	CMP
ROUSTANT	Olivier	MA(MDC)	Mathématiques appliquées	FAYOL
ROUX	Christian	PR	Image Vision Signal	CIS
STOLARZ	Jacques	CR	Sciences et génie des matériaux	SMS
TRIA	Assia	Ingénieur de recherche	Microélectronique	CMP
VALDIVIESO	François	PR2	Sciences et génie des matériaux	SMS
VRICELLE	Jean Paul	DR	Génie des Procédés	SPIN
WOLSKI	Krzystof	DR	Sciences et génie des matériaux	SMS
XIE	Xiaolan	PR1	Génie industriel	CIS
YUGMA	Gallian	CR	Génie industriel	CMP

ENISE : Enseignants-chercheurs et chercheurs autorisés à diriger des thèses de doctorat (titulaires d'un doctorat d'État ou d'une HDR)

BERGHEAU	Jean-Michel	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
BERTRAND	Philippe	MCF	Génie des procédés	ENISE
DUBUJET	Philippe	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
FEULVARCH	Eric	MCF	Mécanique et Ingénierie	ENISE
FORTUNIER	Roland	PR	Sciences et Génie des matériaux	ENISE
GUSSAROV	Andrey	Enseignant contractuel	Génie des procédés	ENISE
HAMDI	Hédi	MCF	Mécanique et Ingénierie	ENISE
LYONNET	Patrick	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
RECH	Joël	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
SMUROV	Igor	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
TOSCANO	Rosario	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE
ZAHOUANI	Hassan	PU	Mécanique et Ingénierie	ENISE

À mes Parents

À ZaHraa et Ali

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier mon directeur de thèse Monsieur Olivier ROUSTANT, Professeur agrégé de l'École Nationale Supérieure des Mines de St-Étienne (ENSM-SE), pour m'avoir accepté en thèse et encadré tout au long de ces trois années durant lesquelles j'ai énormément appris. Je tiens également à remercier ma co-directrice de thèse Madame Laurence GRAMMONT, Maître de Conférences de l'université de Lyon (ICJ, Lyon 1) pour l'encadrement durant cette période. Ensuite, je remercie spécialement mon encadrant Monsieur Xavier BAY, Maître de Conférences agrégé (ENSM-SE) avec qui j'ai beaucoup travaillé et donc appris. Je tiens enfin à remercier Yann RICHEL, docteur et Ingénieur-chercheur de l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN) qui a aussi encadré ces travaux de thèse.

C'est un immense plaisir de pouvoir remercier les Professeurs Christine THOMAS-AGNAN et Fabrice GAMBOA d'avoir accepté de rapporter cette thèse. Je tiens à remercier également les Professeurs Sophie DABO-NIANG et Denis ALLARD d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse en tant qu'examineurs.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Clément CHEVALIER et David GINSBOURGER pour leur soutien ainsi que leurs encouragements pendant le consortium ReDICE. Je tiens à les remercier pour l'invitation à Berne afin de présenter mes travaux. Enfin, je saisis cette occasion ici pour remercier tous les participants du consortium industriel ReDICE (CEA, EDF, IFPEN, IRSN, Renault) et académique (École des Mines de Saint-Étienne, INRIA, et Université de Berne) pour leurs commentaires et suggestions constructives.

Ensuite, mes remerciements vont à Monsieur Nicolas DURRANDE (ENSM-SE), Monsieur Areski COUSIN (ISFA, Lyon 1) et Monsieur Didier RULLIÈRE (ISFA, Lyon 1) pour le travail en collaboration avec l'Institut de Science Financière et d'Assurances (ISFA) à Lyon. Je tiens aussi à remercier avec plaisir le Professeur Christiane ROBERT, directeur de l'ISFA, de m'avoir invité à faire un séminaire et présenter mes travaux.

Un grand merci bien évidemment à Madame Anca BADEA (ENSM-SE) pour la confiance accordée en me confiant l'encadrement de travaux dirigés et travaux pratiques du cours de probabilités et statistique pour les élèves-ingénieurs de l'école des mines. Je tiens à saisir cette occasion pour remercier tous les permanents de l'école des mines, surtout l'équipe DEMO. Je tiens à remercier spécialement notre secrétaire Christine

EXBRAYAT pour sa gentillesse ainsi que les deux techniciens Nilou et Jean-François. Merci également à tous mes amis spécialement Mickael BINOIS et Houssein MOHAMMADI ainsi que mes amis Libanais en France et le groupe des Libanais sur St-Étienne.

Je tiens à remercier aussi ma deuxième famille : ma belle-mère et mon beau-père ainsi que mes belles-sœurs et mon beau-frère et leurs familles respectives, en particulier ma belle-sœur Zeinab et son époux Wissam qui ont conduit mes premiers pas en FRANCE.

C'est le moment de remercier chaleureusement ma famille ZAHRAA et ALI qui ont toujours été à côté de moi. Merci pour leur soutien et la confiance qu'ils m'apportent. Pour conclure, grand merci à mes parents : mon père, ma mère et ma sœur (Mohammad, Fatima et Zeinab) qui sont venus en FRANCE pour assister à ma soutenance thèse. Sans oublier ici de remercier mon frère et ma sœur (Jawad et Hanan) pour la confiance et la fierté qu'ils m'accordent, malgré la distance qui nous sépare.

Enfin, merci à toutes les personnes que je ne cite pas ici mais qui mériteraient d'être cités.

Table des matières

Table des figures	15
Liste des tableaux	21
I Introduction générale et état de l'art	27
1 Introduction générale	29
1.1 Contexte général	29
1.2 État de l'art	30
1.3 Organisation de la thèse	31
1.4 Avertissement	32
1.5 Lien avec les publications	33
II Correspondance entre régression par processus gaussien et splines d'interpolation dans le cas classique	35
2 Interpolation optimale dans les RKHS et lien avec la régression par processus gaussien	37
2.1 Introduction	37
2.2 RKHS-Théorie de Moore-Aronszjan	38
2.3 Sous-espaces hilbertiens et noyaux associés	42
2.4 Processus aléatoires et fonctions de covariance	44
2.4.1 Définitions et notations	44
2.4.2 Processus aléatoires	46
2.4.3 Processus Gaussiens (PG)	47
2.5 Équivalence krigeage et interpolation optimale	48
2.5.1 Interpolation optimale dans un RKHS	48
2.5.2 Correspondance entre régression par processus gaussien et interpolation optimale dans un RKHS	50

2.6	Choix du noyau	52
2.7	Extension à des contraintes linéaires de type inégalité	54
2.8	Conclusion	55
III Régression par processus gaussien sous contraintes linéaires de type inégalité		57
3	Régression par processus gaussien sous contraintes linéaires de type inégalité	59
3.1	Introduction	60
3.2	Approximation par processus gaussien fini-dimensionnel	60
3.3	Approximation en dimension 1	61
3.3.1	Contraintes de borne	61
3.3.2	Contrainte de monotonie	63
3.3.3	Contrainte de convexité	66
3.4	Approximation en dimension $d \geq 2$	67
3.5	Simulation d'un processus gaussien sous contraintes	69
3.6	Exemple numérique motivé	72
3.7	Illustration numérique	72
3.7.1	Monotonie en dimension 1	72
3.7.2	Monotonie en dimension 1 avec des trajectoires de classe C^0	74
3.7.3	Contraintes de borne en dimension 1	76
3.7.4	Convexité en dimension 1	76
3.7.5	Monotonie en dimension 2	77
3.7.6	Convergence numérique	78
3.8	Conclusion	79
4	Nouvelle technique de rejet pour simuler une loi multi-normale tronquée à un espace convexe	83
4.1	Introduction	83
4.2	Méthode de rejet générale	84
4.3	Méthodes de rejet existantes	86
4.4	Algorithme de rejet utilisant le mode (RSM)	87
4.5	Comparaison avec d'autres méthodes de rejet	89
4.5.1	Performance en dimension 1	89
4.5.2	Cas multi-dimensionnel	91
4.6	Conclusion	94

5	Validation croisée adaptée aux contraintes de type inégalité pour estimer les paramètres de covariance d'un processus gaussien	97
5.1	Introduction	97
5.2	Processus gaussien sous contraintes	98
5.3	Approximation finie-dimensionnelle	98
5.4	Estimation des paramètres par validation croisée	99
5.4.1	Validation croisée sans contraintes inégalité	99
5.4.2	Validation croisée avec contraintes inégalité	100
5.4.3	Étude sur un exemple analytique	101
5.4.4	Application réelle de sûreté nucléaire	104
5.5	Conclusion	106
IV	Aspects théoriques : correspondance entre régression par processus gaussien et splines dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité	109
6	Interpolation optimale dans les RKHS sous contraintes linéaires de type inégalité	111
6.1	Introduction	112
6.2	Position du problème	112
6.3	Optimisation discrétisée	115
6.3.1	Le sous-espace d'approximation H_N et les opérateurs π_N et ρ_N	115
6.3.2	Existence et unicité de la solution du problème (P_N)	120
6.3.3	Analyse de la convergence	122
6.3.4	Implémentation du problème (P_N)	126
6.4	Illustration numérique	127
6.4.1	Contraintes de borne	127
6.4.2	Contraintes de monotonie en dimension 1	128
6.4.3	Cas d'un nombre fini de contraintes inégalité	129
6.4.4	Contraintes de monotonie en dimension $d \geq 2$	131
6.5	Cas des splines	135
6.5.1	Spline cubique d'interpolation sous contraintes	135
6.5.2	Spline cubique sous contrainte de borne	138
6.5.3	Spline cubique monotone	138
6.6	Conclusion	144
7	Correspondance entre krigeage et splines dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité	147
7.1	Rappel : splines d'interpolation sous contraintes	147
7.2	Estimation bayésienne	148

7.3	Correspondance dans le cas de la dimension finie	149
7.4	Le résultat principal	152
7.4.1	Loi <i>a priori</i>	152
7.4.2	Approximation et loi <i>a posteriori</i>	152
7.4.3	Analyse asymptotique	153
7.5	Illustration numérique	159
7.6	Conclusion	160

V Application réelle en assurance et finance : estimation d'une courbe d'actualisation et de probabilités de défaut 163

8 Estimation de la courbe d'actualisation et de probabilités de défaut par krigeage sous contraintes 165

8.1	Introduction	165
8.2	Interpolation sous contraintes linéaires	166
8.3	Modèle d'interpolation monotone	167
8.4	Cas de la dimension 1	167
8.4.1	Simulation des trajectoires	167
8.4.2	Courbe la plus probable	168
8.5	Cas de la dimension 2	169
8.6	Estimation des paramètres de covariance	170
8.6.1	Paramètre de portée	170
8.6.2	Paramètre d'échelle	170
8.7	Étude empirique	170
8.7.1	Euribor data	171
8.7.2	Overnight Indexed Swaps (OIS) discount curve	176
8.7.3	Credit Default Swaps (CDS) data	180
8.8	Conclusion	183

9 Conclusion et perspectives 185

9.1	Conclusion	185
9.2	Perspectives	186

A Dérivées partielles du noyau de covariance 189

B Liste des articles scientifiques 191

B.1	Articles de journal	191
B.2	Chapitre proceeding dans une conférence sélective	191
B.3	Proceeding	192
B.4	Package	192

C Liste des conférences internationales	193
C.1 Invitations	193
Bibliographie	195

TABLE DES MATIÈRES

Table des figures

1	Deux trajectoires simulées du mouvement brownien sur $[0, 1]$	48
2	Trajectoires simulées du pont brownien sur $[0, 1]$ et prédiction.	52
3	Fonctions de covariance classiques Figure 3a et une réalisation du processus gaussien associé Figure 3b. Les paramètres sont fixés à $(\sigma^2, \theta) = (1, 0.3)$	53
4	La moyenne de krigeage sous conditions d'interpolation.	55
5	Les fonctions de base h_j , $(0 \leq j \leq 4)$ (Figure 5a) et la fonction h (Figure 5b).	62
6	Les fonctions de base ϕ_j , $(0 \leq j \leq N = 4)$ (Figure 6a) et la fonction ϕ_2 avec sa dérivée h_2 (Figure 6b).	64
7	Les fonctions de base ϕ_j , $(0 \leq j \leq N = 4)$ (Figure 7a) et ϕ_2 de dérivée seconde h_2 (Figure 7b).	67
8	Deux cas de simulation d'une loi normale tronquée. La moyenne est à l'intérieur (resp. à l'extérieur) de la zone d'acceptation Figure 8a (resp. Figure 8b).	71
9	La vraie fonction évaluée en sept points d'observation [Golchi et al., 2015] : (a) 100 simulations d'un PG sans tenir compte des contraintes inégalité et la moyenne <i>a posteriori</i> , (b) moyenne <i>a posteriori</i> et l'intervalle de prédiction à 95% en utilisant toujours le PG sans contraintes, et (c) le mode et l'intervalle de prédiction à 95% en utilisant le modèle (3.7) sous les deux contraintes d'interpolation et de monotonie.	73
10	Simulations d'un processus gaussien (trajectoires en gris) conditionnellement monotone croissant sur le domaine $[0, 1]$. La moyenne de krigeage usuelle (tiret-pointillé bleu) coïncide avec le mode (Maximum <i>A Posteriori</i>) et respecte les contraintes de monotonie sur la Figure 10a mais pas sur la Figure 10b.	74
11	Réalisations simulées (courbes grises) du modèle (3.5) en utilisant la Remarque 1. Remarquons que ces réalisations sont continues (non dérivables) et monotones sur tout le domaine. Le noyau Matérn 3/2 est utilisé sur la Figure 11a et le noyau gaussien sur la Figure 11b.	75

TABLE DES FIGURES

12	Réalisations simulées (courbes en gris) d'un processus gaussien conditionnellement positif (Figure 12a) et borné (Figure 12b). La moyenne de krigeage usuelle et le mode coïncident sur la Figure 12a mais pas sur la Figure 12b.	76
13	Simulations d'un processus gaussien conditionnellement convexe. La moyenne de krigeage usuelle (courbe bleue en tiret-pointillé) ne respecte pas les contraintes de convexité, contrairement au mode et la moyenne de krigeage convexe.	77
14	Les points expérimentaux pour la monotonie 2D (points noirs) et les nœuds $(u_i, u_j)_{0 \leq i, j \leq 7}$ qui sont utilisés pour construire les fonctions de base.	78
15	Réalisations d'un processus gaussien conditionnellement monotone par rapport aux deux variables (Figure 15a). Lignes de niveau associées à une simulation (Figure 15b).	79
16	Surfaces simulées de l'exemple numérique utilisé pour la Figure 15a. Elles sont monotones par rapport aux deux variables.	80
17	Simulations d'un processus gaussien conditionnellement monotone (croissant) par rapport à la première variable et lignes de niveau associées.	81
18	La courbe noire dans les deux figures représente la fonction mode du processus gaussien conditionnellement borné entre 0 et 1 pour $N = 500$. La courbe en tiret rouge est la fonction mode pour $N = 10$ (Figure 18a) et $N = 20$ (Figure 18b). Remarquons que la courbe en tiret rouge coïncide quasiment avec la courbe noire pour $N = 20$	81
19	La courbe noire dans les deux figures représente la fonction mode du processus gaussien conditionnellement monotone pour $N = 500$. La courbe en tiret rouge est la fonction mode pour $N = 10$ (Figure 19a) et $N = 20$ (Figure 19b). Remarquons que la courbe en tiret rouge coïncide quasiment avec la courbe noire pour $N = 20$	82
20	Produit scalaire entre le vecteur gradient $\Sigma^{-1}\mu^*$ de la fonction $\frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1}x$ au point μ^* et le vecteur $(x - \mu^*)$ pour $x \in C$. Les ellipsoïdes représentent les lignes de niveau associées à la fonction $x \mapsto \frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1}x$	88
21	Loi normale centrée réduite tronquée sur $[\mu^-, +\infty]$ où $\mu^- = 0.5$ (Figure 21a) et $\mu^- = 1.5$ (Figure 21b).	90
22	Algorithme de rejet usuel avec 2000 simulations d'un vecteur gaussien centré. Le taux d'acceptation est égal à 7.85%.	92
23	Algorithme de rejet en utilisant le mode dans 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 23.55%.	92
24	L'algorithme de rejet usuel en utilisant 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 3.8%.	93
25	L'algorithme de rejet par le mode en utilisant 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 20.5%.	93

26	$n = 9$ points d'évaluation d'une fonction analytique.	102
27	L'estimateur mode sans tenir compte de la première observation (Figure 27a) et sans l'avant-dernière (Figure 27b). Le mode est monotone sur tout le domaine et interpole les autres points d'observation.	102
28	L'EQM empirique par LOO adapté qui est définie dans l'équation (5.6) (courbe noire) et la valeur optimale de cette fonction qui vaut 2.44 au point $\hat{\theta}_{VCA} = 0.75$	103
29	La fonction $ f(x) - M_{KI}(x, \theta) $ en utilisant le paramètre θ qui est estimé par les méthodes suivantes : Maximum de Vraisemblance (courbe en bleue), VC non adaptée (courbe en rouge) et VC adaptée aux contraintes (courbe en vert).	104
30	Les observations en dimension 2 (Figure 30a). La fonction mode (Figure 30b) sous les conditions d'interpolation et les contraintes de monotonie.	105
31	La moyenne de krigeage usuelle en utilisant le noyau gaussien bi-varié et les paramètres de portée $\hat{\theta}_{VC} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) = (9.05, 9.10)$ estimés par VC (Figure 31a). Le mode en utilisant le noyau gaussien et les paramètres $\theta = (25.17, 10.57)$ estimés par VC adaptée aux contraintes (Figure 31b).	106
32	Les valeurs estimées contre les vraies valeurs en utilisant la moyenne de krigeage usuelle comme estimateur (Figure 32a) et le mode (Figure 32b).	107
33	La fonction $\pi_N(g_N)$ dans la voisinage du point d'observation $x^{(k)}$	121
34	Fonction d'interpolation sans et avec contraintes de borne (Figure 34a). Convergence de la solution discrétisée \hat{h}_N , $N = 10$ et $N = 50$ (Figure 34b).	128
35	Fonction d'interpolation sans et avec contraintes de monotonie (Figure 35a). Convergence de la solution discrétisée \hat{h}_N pour $N = 5$ et $N = 20$ (Figure 35b).	130
36	La courbe noire représente la spline d'interpolation sous contraintes en utilisant le noyau Matérn 3/2. La courbe en tirets rouges correspond à la fonction \hat{h}_N pour $N = 10$ (Figure 36a) et $N = 40$ (Figure 36b).	132
37	La courbe noire représente la spline d'interpolation sous contraintes en utilisant le noyau gaussien. La courbe en tirets rouges correspond à la fonction \hat{h}_N pour $N = 10$ (Figure 37a) et $N = 40$ (Figure 37b).	132
38	Les points de design pour la monotonie en 2D (points noirs) et la grille utilisée pour construire les fonctions de base.	133
39	La solution \hat{h}_N du problème d'optimisation discrétisé (P_N), Figure 39a et les lignes de niveau associées, Figure 39b.	134
40	La solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) \hat{h}_N en utilisant la Remarque 2 (Figure 40a) et les lignes de niveau associées (Figure 40b).	135
41	Spline cubique dans une bande (respectivement positive) Figure 41a (resp. Figure 41b) et spline cubique sans tenir compte des contraintes (courbe en noir).	139

TABLE DES FIGURES

42	Spline cubique monotone en utilisant quatre méthodes différentes (Figure 42a). Différence entre les deux splines proposées par FC et Hyman (Figure 42b).	140
43	Le critère EL approché associé à l’algorithme décrit dans ce chapitre en utilisant les observations de FC (Figure 43a). Comparaison entre “Hyman” et “FC” splines (Figure 43b).	141
44	Splines cubiques monotones par quatre méthodes différentes en utilisant les données de Akima. La courbe rouge représente la solution proposée dans ce chapitre. Elle est monotone sur tout le domaine.	142
45	Le critère EL approché associé à la solution proposée dans ce chapitre en utilisant les données de Akima (Figure 45a). Comparaison entre les splines cubiques monotones proposées par ‘Hyman’ et ‘FC’ (Figure 45b).	142
46	Splines cubiques monotones en utilisant les données de Wolberg : la méthode de Hyman (courbe en bleu) et la fonction \hat{h}_N avec $N = 1000$ (courbe en rouge). La différence entre ces deux fonctions est illustrée sur la Figure 46b.	143
47	Le critère EL approché pour l’algorithme décrit dans ce chapitre en utilisant les données de Wolberg.	145
48	La moyenne de krigeage sans et avec contraintes inégalité et le mode en utilisant le noyau gaussien. Les contraintes de borne sont respectivement $[-20, 20]$ et $[-30, 30]$ (Figure 48a et Figure 48b).	160
49	1000 simulations d’un processus gaussien (trajectoires en gris) conditionnellement bornées entre $[-30, 60]$ sur le domaine $[0, 1]$. La moyenne de krigeage usuelle, la moyenne de krigeage bornée et le mode coïncident.	161
50	La fonction à optimiser dans le critère LOO (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) comme fonction de covariance Figure 50a (resp. Figure 50b).	172
51	Simulations d’un processus gaussien (trajectoires grises) conditionnellement monotone décroissant et sans tenir compte de l’avant-dernière contrainte égalité. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 51a (resp. Figure 51b).	173
52	Simulations d’un processus gaussien (trajectoires grises) conditionnellement décroissant en utilisant le noyau Matérn 5/2 comme fonction de covariance avec les paramètres $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.3, 30.8)$ (Figure 52a) et le noyau Matérn 3/2 avec les paramètres $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.2, 47.9)$ (Figure 52b).	174
53	Taux au comptant pour les simulations et le mode du processus gaussien conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 53a (resp. Figure 53b).	174

54	Simulations du taux forward et mode du PG conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 54a (resp. Figure 54b). . .	175
55	Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable seulement.	176
56	La fonction à optimiser dans le critère LOO (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (Figure 56a) et le noyau Matérn 3/2 (Figure 56b).	177
57	Simulations d'un processus gaussien conditionnellement décroissant et sans tenir compte de l'avant-dernière contrainte égalité. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé Figure 57a (resp. Figure 57b) avec le paramètre de portée $\hat{\theta}$ associé. Le paramètre d'échelle $\hat{\sigma}^2$ est fixé à 1 pour les deux figures.	178
58	Simulation d'un processus gaussien conditionnellement monotone en utilisant le noyau Matérn 5/2 avec $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.5, 24.3)$ (Figure 58a) et le noyau Matérn 3/2 avec $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.2, 60.7)$ (Figure 58b).	179
59	Taux au comptant pour les trajectoires simulées et le mode du processus gaussien conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 59a (resp. Figure 59b).	179
60	Simulations du taux forward et mode du PG conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 60a (resp. Figure 60b). . .	180
61	Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable en utilisant les données OIS définies dans la Table 8.2.	181
62	La fonction à optimiser (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) Figure 62a (resp. Figure 62b).	182
63	Simulations d'un processus gaussien (courbes en gris) conditionnellement monotone (décroissant) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) Figure 63a (resp. Figure 63b).	183
64	Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable en utilisant les différentes dates de cotation définies dans la Table 8.3.	184

TABLE DES FIGURES

Liste des tableaux

2.1	Noyaux de covariance usuels pour la modélisation par processus gaussien.	53
4.1	Comparaison entre l'algorithme de rejet usuel et l'algorithme RSM dans le cas où la probabilité de l'intervalle tronqué est faible. La zone admissible est $C = [\mu^-, +\infty[$.	90
4.2	Comparaison du taux d'acceptation entre l'algorithme RSM et l'algorithme présenté dans [Robert, 1995] en fonction de la distance entre μ^- et μ^+ . Dans ce cas, la zone d'acceptation est $C = [\mu^-, \mu^+]$, où μ^- est fixé à 1.	91
4.3	Comparaison entre l'algorithme de rejet usuel et RSM pour des dimensions plus grandes. La zone d'acceptation est $C = [\mu^-, +\infty[^d$.	94
6.1	Observations bornées sur $[0, 1]$.	138
6.2	Observations positives sur $[0, 1]$.	138
6.3	RPN 15A Fritsch-Carlson's data (LLL radiochemical calculations).	140
6.4	Les données de Akima utilisées pour comparer différentes méthodes.	141
6.5	Les données monotones de Wolberg.	143
6.6	Le critère de l'énergie linéaire pour différentes méthodes en utilisant les données de Worlberg.	144
8.1	L'estimation du paramètre de portée en utilisant la méthode de validation croisée adaptée (Swap versus Euribor 6M).	172
8.2	Estimation des paramètres en utilisant la méthode de VC adaptée aux contraintes (OIS data).	177
8.3	Estimation des paramètres en utilisant la méthode de VC adaptée (CDS data).	182

Notations et abréviations

$(\cdot, \cdot)_H$	produit scalaire dans un espace de Hilbert H
$(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$	espace probabilisé
$:=$	égalité vue comme définition
$\mathbf{k}(\mathbf{x})$	vecteur de covariance entre la variable au point \mathbf{x} et les observations aux points $x^{(i)}$
\mathbf{X}	ensemble des points $x^{(i)}$ observations
\mathbf{x}	variable d'entrée dans un sous-espace de \mathbb{R}^d
\mathbf{y}	vecteur de sortie
Cov	Covariance
δ_x	fonction de Kronecker
Γ^N	matrice de covariance des coefficients ξ_j
$\hat{\sigma}_{M_3}$	paramètre d'échelle du noyau Matérn 3/2 estimé par la méthode de validation croisée adaptée
$\hat{\sigma}_{M_5}$	paramètre d'échelle du noyau Matérn 5/2 estimé par la méthode de validation croisée adaptée
$\hat{\theta}_{M_3}$	paramètre de portée du noyau Matérn 3/2 estimé par la méthode de validation croisée adaptée
$\hat{\theta}_{M_5}$	paramètre de portée du noyau Matérn 5/2 estimé par la méthode de validation croisée adaptée
\mathbb{K}	matrice de covariance entre les observations $x^{(i)}$
\mathbb{R}^X	espace vectoriel réel de toutes les applications de X dans \mathbb{R}
\mathcal{I}^*	opérateur adjoint de \mathcal{I}
$\mathcal{N}(m, \sigma^2)$	loi normale de moyenne m et de variance σ^2

$\mathcal{PG}(m(\mathbf{x}), K(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$	Processus gaussien de noyau la fonction m et de covariance la fonction K
$\mathcal{U}[a, b]$	loi uniforme sur $[a, b]$
$\mathbf{1}$	fonction indicatrice
\mathbb{E}	Espérance
\mathbb{P}	Probabilité
$\max(x, y)$	maximum entre x et y
$\min(x, y)$	minimum entre x et y
$\widehat{H \cap C}^{\circ}$	intérieur de $H \cap C$ dans H
\perp	orthogonal
ϕ_j	fonctions de base
\rightharpoonup	convergence faible
σ^2	paramètre de variance ou d'échelle
θ	paramètre de portée
\top	transposée d'un vecteur ou d'une matrice
Var	Variance
$\text{Vect} \{K(\cdot, x), x \in X\}$	espace vectoriel engendré par les fonctions $K(\cdot, x)$
C	ensemble convexe
C_ξ	ensemble de contraintes linéaires de type inégalité sur les coefficients ξ_j
d	dimension de l'espace d'entrée
$\text{diag}(\Gamma)$	matrice obtenue en fixant à zéro tous les termes en dehors de la diagonale de la matrice Γ
E'	dual de E espace vectoriel normé
$f_{\mathcal{N}}$	densité d'une loi normale
I	espace des fonctions interpolantes
I_d	matrice identité de taille d
I_ξ	ensemble des contraintes de type égalité (interpolation) sur les coefficients ξ_j

id	application identité
$K(x, x')$	fonction de covariance ou noyau reproduisant
K_N	noyau de covariance du processus gaussien de dimension finie Y^N
$L^2(\mathbb{P})$	espace des variables aléatoires de carré intégrable
M_{KI}	fonction <i>mode</i> sous contraintes inégalité
n	nombre d'observations
P_C	projection orthogonale sur le convexe C
$x^{(i)}$	$i^{\text{ème}}$ observation (point expérimental)
$Y(\mathbf{x}, \omega)$	processus ou champ aléatoire
$Y^N(x, \omega)$	processus gaussien de dimension finie
CDS	Credit Default Swaps
EL	Energie Linéaire
EMV	Estimation par Maximum de Vraisemblance
EQM	Erreur Quadratique Moyenne
$\text{Hilb}(E)$	ensemble des sous-espaces hilbertiens de E
LE	Linear Energy
LOO	Leave One Out
LOOA	Leave One Out Adapté
MAP	Maximum A Posteriori
McMC	Méthode de Monte-Carlo par chaîne de Markov
n.r.	noyau reproduisant
OIS	Overnight Indexed Swaps
PG	Processus Gaussien
PQ	Programme Quadratique
RKHS	Reproducing Kernel Hilbert Space
RPG	Régression par Processus Gaussien
RSM	Rejection Sampling from the Mode
v.a.r.	variable aléatoire réelle
VC	Validation Croisée
VCA	Validation Croisée Adaptée

Première partie

Introduction générale et état de l'art

Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1	Contexte général	29
1.2	État de l’art	30
1.3	Organisation de la thèse	31
1.4	Avertissement	32
1.5	Lien avec les publications	33

1.1 Contexte général

Cette thèse est consacrée à l’étude de méthodes d’interpolation d’une fonction numérique d’une ou plusieurs variables réelles lorsque la fonction à interpoler est connue pour satisfaire certaines propriétés. Ainsi, on s’intéresse à un problème d’interpolation sous contraintes. Dans toutes les situations considérées dans ce travail, les contraintes se traduisent sous la forme de contraintes linéaires de type inégalité. De ce fait, l’espace des contraintes sera toujours supposé convexe.

Dans certaines applications réelles en effet, des informations *a priori* sur la fonction à interpoler sont souvent disponibles comme des bornes sur les valeurs de la fonction (par exemple, positivité), la monotonie par rapport à une ou plusieurs variables ou encore la convexité. Dans le cadre de calculs en radiochimie, la concentration chimique admet des valeurs comprises entre 0 et 1. En conception automobile, les dimensions des pièces x_i du véhicule (en entrée) et sa masse y (en sortie) présentent des relations de monotonie. Dans le domaine de l’assurance (actuariat), le facteur d’actualisation comme fonction de la maturité est *a priori* une fonction décroissante, qui démarre de 1 et qui tend vers 0.

Deux classes de méthodes sont envisagées. D’une part, on se ramène à un problème d’optimisation contrainte dans un *espace de Hilbert à noyau reproduisant* (RKHS). Dans

ce cadre purement déterministe, le problème est bien posé et revient à un problème de projection sur un convexe (fermé) dans un espace de Hilbert. D'autre part, on considère le même problème comme un problème d'estimation d'une fonction dans un cadre probabiliste (inférence bayésienne). De manière plus précise, on considère le problème de *Régression par Processus Gaussien* (RPG) ou de *krigeage* lorsque la fonction à interpoler vérifie les contraintes linéaires de type inégalité en question.

1.2 État de l'art

Les méthodes d'interpolation optimale dans un RKHS (cadre déterministe) sont basées sur la théorie des splines, voir par exemple [Michelli and Utreras, 1988], [Ramsay, 1988], [Ramsay, 1998], [Wolberg and Alfy, 2002], [Wright and Wegman, 1980] et [Xuming and Peide, 1996]). Le deuxième type de méthode repose sur la simulation d'un processus gaussien conditionnel (RPG) en utilisant une subdivision de l'espace d'entrée (voir par exemple [Abrahamsen and Benth, 2001], [Da Veiga and Marrel, 2012], [Golchi et al., 2015], [Riihimaki and Vehtari, 2010] et [Xiaojing, 2012]). Pour les contraintes de monotonie, une approche avec des observations bruitées a été développée dans [Riihimaki and Vehtari, 2010]. Dans [Golchi et al., 2015], l'idée est de construire un modèle de processus gaussien capable d'intégrer les contraintes de monotonie dans la sortie d'un simulateur numérique par rapport à une ou plusieurs variables d'entrée. L'idée est similaire à celle utilisée dans [Riihimaki and Vehtari, 2010] en tenant compte d'information sur la dérivée à des endroits spécifiques pour forcer la monotonie des trajectoires du processus. Dans ce dernier cas, les conditions d'interpolation sont intégrées dans le modèle, ce qui n'est pas fait dans [Riihimaki and Vehtari, 2010]. Avec cette méthodologie, la monotonie n'est pas assurée sur tout le domaine. Cela est dû au fait que l'ensemble des contraintes inégalité (continuum d'inégalités) sont remplacées par un nombre fini d'entre elles. Récemment, une nouvelle méthodologie basée sur une approximation par discrétisation de l'espace d'entrée pour intégrer les contraintes de type égalité et inégalité dans un processus gaussien a été développée dans [Da Veiga and Marrel, 2012]. Par cette stratégie, les contraintes inégalité ne sont pas non plus toutes assurées.

Dans l'approche déterministe, par exemple [Villalobos and Wahba, 1987], l'idée est d'utiliser les splines comme fonctions d'interpolation dans le cas d'un nombre fini de contraintes linéaires de type inégalité. En général, une manière pour garantir les contraintes inégalité est d'utiliser un modèle avec fonctions de base. Dans ce cas, l'utilisation de B-splines a été introduite la première fois par Ramsay dans ses articles [Ramsay, 1988] et [Ramsay, 1998] dans le cas de la monotonie. Comme les fonctions B-splines sont des fonctions positives, l'idée naturelle est de considérer la dérivée de la fonction à interpoler comme une combinaison à coefficients positifs de ces fonctions de base définies avec des nœuds bien choisis. Cette approche a été utilisée dans une application réelle en économétrie [Dole, 1999]. Dans [Xuming and Peide, 1996], l'idée est la

même que dans [Ramsay, 1988] sauf que les coefficients sont calculés par un problème d’optimisation linéaire fini-dimensionnel utilisant les données d’observation. La difficulté d’une telle stratégie est liée au passage au cas multi-dimensionnel.

Sous le même type de contraintes inégalité, d’autres approches bayésiennes ont été développées, voir [Csiszar et al., 1999] et [Gamboa and Gassiat, 1997]. Par exemple, la méthode d’interpolation décrite dans [Gamboa and Gassiat, 1997] a été utilisée pour résoudre des problèmes d’inversion.

Sans tenir compte des contraintes inégalité, la correspondance entre ces deux types de méthodes (déterministe et probabiliste) a été établie, voir e.g. [Kimeldorf and Wahba, 1971], [Marcotte and David, 1988] et [Matheron, 1981]. Ce lien est plus compliqué dans le cas de contraintes de type inégalité, voir les séries de travaux suivants : [Delecroix and Thomas-Agnan, 1995], [Delecroix et al., 1996] et [Delecroix and Thomas-Agnan, 2000].

1.3 Organisation de la thèse

Dans le chapitre 2, on présente brièvement le cadre théorique de l’interpolation optimale dans un RKHS et de la régression par processus gaussien en l’absence de contraintes de type inégalité. De plus, on établit la correspondance naturelle entre ces deux approches lorsque le noyau reproduisant de l’approche RKHS est confondu avec la fonction de covariance caractérisant le processus gaussien (ou la loi *a priori*) de l’approche probabiliste.

Dans le Chapitre 3, on propose une méthode d’approximation pour la régression par processus gaussien sous contraintes. Pour cela, on approche le processus gaussien (PG) initial par un (PG) de dimension finie (i.e. ses trajectoires sont dans un espace de dimension finie). Cette approximation est construite par combinaison linéaire finie de fonctions de base déterministes (idée des B-splines) avec un vecteur de coefficients aléatoires gaussien (pour assurer la variabilité du processus proposé). On montre que ces fonctions de base peuvent être choisies de sorte que l’ensemble des contraintes inégalité sur le PG fini-dimensionnel soient équivalentes à un ensemble *fini* de contraintes inégalité sur les coefficients. Dans ce cas, n’importe quelle simulation *a posteriori* conduit à une fonction d’interpolation qui vérifie l’ensemble des contraintes inégalité. De plus, la simulation du modèle d’approximation proposé sous les conditions d’interpolation et les contraintes inégalité revient à simuler un vecteur gaussien (coefficients aléatoires) tronqué à un sous-espace convexe¹. Un nouvel estimateur appelé *mode* (Maximum *A Posteriori*) a été défini. C’est la fonction ou courbe la plus probable parmi les fonctions interpolantes vérifiant les propriétés en question. Différents cas de simulation ont été décrits en détails (en particulier, la monotonie en dimension 1 et 2).

La mise en œuvre de la méthode d’approximation précédente conduite au problème de la simulation d’une loi normale multivariée tronquée à un sous-espace convexe de \mathbb{R}^d . Pour

1. L’espace convexe est formé par les contraintes linéaires égalité et inégalité sur les coefficients

les besoins expérimentaux de ce travail de thèse, s'est posée rapidement la question de la simulation d'une telle loi tronquée (dans un espace de dimension grande en général qui dépend du degré d'approximation). On a choisi une adaptation de l'algorithme de rejet usuel qui profite pleinement du calcul du mode comme le maximum de vraisemblance *a posteriori*. De plus, cette méthode de simulation a l'avantage d'être exacte. C'est l'objet du Chapitre 4. Soulignons que cet aspect du travail n'était pas un objectif de la thèse au départ et que la solution apportée est très largement insuffisante en pratique. Elle peut être jugée satisfaisante si la fonction à interpoler dépend de 1 ou 2 variables.

Au Chapitre 5, on examine le problème de l'estimation des hyper-paramètres de la fonction de covariance dans le cadre de la régression par PG sous contraintes. Dans ce cas, un critère d'Erreur Quadratique Moyenne empirique par Leave One Out adapté aux contraintes linéaires de type inégalité est considéré. Dans un exemple numérique en dimension 1, on montre l'efficacité de l'algorithme proposé et on le compare avec les méthodes d'estimation classiques. Une application réelle à des données nucléaires en dimension 2 a été développée pour étudier la performance de la méthode proposée.

Dans une partie plus théorique (Partie IV), on s'intéresse à la correspondance entre les deux approches (déterministe et probabiliste) dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité envisagé dans ce travail. Dans le Chapitre 6, on reprend le problème d'interpolation optimale sous contraintes dans un RKHS en proposant une méthode d'approximation directement inspirée de la méthode d'approximation développée au Chapitre 3 pour résoudre le problème de régression par processus gaussien sous contraintes, ce qui fournit un algorithme pour (par exemple) le calcul d'une spline d'interpolation contrainte. On établit la convergence de la méthode : c'est le résultat principal de ce chapitre. La correspondance précise entre les deux approches fait l'objet du Chapitre 7 suivant. C'est le résultat principal de la thèse.

Dans une dernière partie applicative (Partie V, Chapitre 8), on s'intéresse à l'estimation d'une courbe d'actualisation dans le domaine de l'assurance (actuariat) ou finance. Cette courbe est *a priori* décroissante comme fonction de la maturité. Dans cette application, on ne dispose pas directement d'observations de la fonction. Par contre, les informations de marché disponibles (cotations) se traduisent sous la forme de contraintes linéaires de type égalité. Le modèle d'approximation proposé dans le Chapitre 3 ainsi que le critère d'Erreur Quadratique Moyenne empirique sont adaptés à ce type de contraintes égalité. Des illustrations numériques à partir de données réelles sont proposées en dimension 1 et 2.

1.4 Avertissement

Dans tout le manuscrit, on emploiera indifféremment les termes de *régression par processus gaussien* et *krigeage* sachant que les données d'observation sont supposées non bruitées (cadre de l'interpolation).

Par ailleurs, le Chapitre 6 peut être lu indépendamment des autres parties par un lecteur (non probabiliste) qui s'intéresserait uniquement au problème d'interpolation optimale sous contraintes linéaires de type inégalité dans un RKHS. En particulier, la preuve de la convergence de la méthode d'approximation pour construire la spline d'interpolation contrainte repose uniquement sur des arguments d'analyse fonctionnelle. Ces mêmes arguments sont largement repris dans le Chapitre 7 pour démontrer la correspondance naturelle entre krigeage et splines dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité. Ainsi, le lecteur pourra avoir le sentiment à juste titre de lire deux fois la même démonstration...

1.5 Lien avec les publications

Le Chapitre 3 a fait l'objet de l'article 'Gaussian Process Emulators for Computer Experiments with Inequality Constraints' en révision pour publication dans *SIAM/ASA Journal Uncertainty Quantification* avec une communication orale à une conférence internationale *Uncertainty Computer Model (UCM2014)*, Sheffield, United Kingdom.

Ensuite, le résultat du Chapitre 4 a été accepté pour une présentation orale dans une conférence sélective *Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC2014)*, Leuven, Belgium. Un article est accepté pour publication dans le livre 'Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2014, Springer-Verlag, Berlin, 2016'.

La méthode de validation croisée adaptée aux contraintes linéaires de type inégalité décrite dans le Chapitre 5 a été présentée et publiée dans la conférence internationale *Spatial Statistics Emerging Patterns (SS2015)*, Avignon, France.

Le résultat théorique du Chapitre 6 a été soumis dans un journal international avec une présentation orale dans une conférence internationale *Mascot-Num2015*, St-Étienne, France.

La correspondance du Chapitre 7 fait l'objet d'un article qui est soumis dans un journal international.

Finalement, l'application réelle présentée dans le Chapitre 8 est soumise dans un journal international.

Voir Annexe B pour les références précises.

1.5. LIEN AVEC LES PUBLICATIONS

Deuxième partie

Correspondance entre régression par
processus gaussien et splines
d'interpolation dans le cas classique

Chapitre 2

Interpolation optimale dans les RKHS et lien avec la régression par processus gaussien

Sommaire

2.1	Introduction	37
2.2	RKHS-Théorie de Moore-Aronszjan	38
2.3	Sous-espaces hilbertiens et noyaux associés	42
2.4	Processus aléatoires et fonctions de covariance	44
2.4.1	Définitions et notations	44
2.4.2	Processus aléatoires	46
2.4.3	Processus Gaussiens (PG)	47
2.5	Équivalence krigeage et interpolation optimale	48
2.5.1	Interpolation optimale dans un RKHS	48
2.5.2	Correspondance entre régression par processus gaussien et interpolation optimale dans un RKHS	50
2.6	Choix du noyau	52
2.7	Extension à des contraintes linéaires de type inégalité	54
2.8	Conclusion	55

2.1 Introduction

Ce chapitre a pour but de présenter le lien naturel qui existe entre deux approches classiques pour résoudre un problème d'interpolation (sans contraintes de type inégalité). D'un côté, une approche déterministe conduit à considérer un problème d'optimisation

sous contraintes égalité (conditions d'interpolation) dans un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS), la norme dans cet espace pouvant être vue comme un critère de régularisation. De l'autre côté, une approche probabiliste considère le problème d'interpolation comme un problème d'estimation d'une fonction dans un cadre bayésien. Avant de présenter ce lien, nous signalons que le cadre probabiliste permet également de construire des intervalles de prédiction autour de la fonction estimée, aspect qui ne sera pas développé dans ce chapitre.

2.2 Espaces de Hilbert à noyau reproduisant ou RKHS-Théorie de Moore-Aronszjan

Soit H un espace vectoriel réel. Un produit scalaire sur H est une application $(\cdot, \cdot)_H : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ vérifiant :

1. $(\cdot, \cdot)_H$ est bilinéaire
2. $\forall h_1, h_2 \in H, (h_1, h_2)_H = (h_2, h_1)_H$ (symétrie)
3. $\forall h \in H, (h, h)_H \geq 0$. De plus, $(h, h)_H = 0$ si et seulement si $h = 0$.

On dit encore que $(\cdot, \cdot)_H$ est une forme bilinéaire symétrique définie positive. On pose $\|h\|_H = \sqrt{(h, h)_H}$. On peut montrer à l'aide de l'inégalité de Cauchy-Schwarz que $\|\cdot\|_H$ est une norme sur H . Par définition, un espace de Hilbert réel est un espace vectoriel réel muni d'un produit scalaire qui le rend complet pour la norme associée. On note H' le dual (topologique) de H qui est l'ensemble des applications linéaires *continues* de H dans \mathbb{R} .

Théorème 1 (Théorème de représentation de Riesz). *Soient H un espace de Hilbert et $\varphi \in H'$. Alors*

$$\exists! h_\varphi \in H, \forall h \in H, \varphi(h) = (h, h_\varphi)_H.$$

On définit maintenant les espaces de Hilbert à noyau reproduisant. Pour cela, on se donne un ensemble quelconque X non vide. On notera \mathbb{R}^X l'espace vectoriel réel de toutes les applications de X dans \mathbb{R} .

Définition 1. *H est un RKHS (Reproducing Kernel Hilbert Space) sur l'ensemble X si*

1. $H \subset \mathbb{R}^X$,
2. H est un espace de Hilbert,
3. $\forall x \in X, \delta_x \in H'$ où $\delta_x : h \in H \rightarrow h(x)$ (fonctionnelle d'évaluation au point $x \in X$).

Définition 2 (Définition alternative). H est un RKHS de noyau reproduisant (n.r.) la fonction $K : X \times X \longrightarrow \mathbb{R}$ si

1. $H \subset \mathbb{R}^X$,
2. H est un espace de Hilbert,
3. $\forall x \in X, K(\cdot, x) \in H$ où $K(\cdot, x) : x' \in X \longrightarrow K(x', x)$,
4. (Propriété de reproduction). Pour tout x dans X et h dans H ,

$$h(x) = (h, K(\cdot, x))_H. \quad (2.1)$$

Les deux définitions sont équivalentes par le théorème de Riesz qui établit que toute forme linéaire continue sur H peut être identifiée à un élément de H (cf. Théorème 1).

Par ailleurs, le noyau reproduisant K d'un RKHS est unique. En effet, si K_1 et K_2 sont deux n.r., la propriété de reproduction implique $(K_1(\cdot, x'), K_2(\cdot, x))_H = K_1(x, x')$ en utilisant le fait que K_2 est un noyau reproduisant. De même, $(K_2(\cdot, x), K_1(\cdot, x'))_H = K_2(x', x)$, ce qui prouve

$$K_1(x, x') = K_2(x', x)$$

par symétrie du produit scalaire. De là, $K_1 = K_2$.

Propriétés du noyau reproduisant. $K : (x, x') \in X \times X \longrightarrow K(x, x') \in \mathbb{R}$ vérifie

$$K(x, x') = (K(\cdot, x'), K(\cdot, x))_H.$$

En particulier, K est *symétrique*, i.e. $K(x, x') = K(x', x)$.

K est une fonction de *type positif* au sens où :

$$\sum_{i,j=1}^n \phi_i \phi_j K(x_i, x_j) \geq 0,$$

pour tout choix $x_1, \dots, x_n \in X$ et $\phi_1, \dots, \phi_n \in \mathbb{R}$.

En effet, la matrice $(K(x_i, x_j))_{1 \leq i, j \leq n}$ est une matrice de produit scalaire et

$$\sum_{i,j=1}^n \phi_i \phi_j K(x_i, x_j) = \left\| \sum_{i=1}^n \phi_i K(\cdot, x_i) \right\|_H^2 \geq 0.$$

Sous-espace dense dans un RKHS. Soit

$$\mathcal{H}_1 := \text{Vect} \{K(\cdot, x), x \in X\} = \left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i K(\cdot, x_i), n \geq 1, \lambda_i \in \mathbb{R}, x_i \in X \right\}.$$

D'après la Définition 2, \mathcal{H}_1 est un sous-espace vectoriel de H et $\mathcal{H}_1^\perp = \{0\}$ en vertu de la propriété de reproduction. Ainsi, \mathcal{H}_1 est un sous-espace dense dans H . Ce sous-espace permet de se faire une première représentation simple des éléments d'un RKHS à partir de son noyau reproduisant. Le résultat suivant au cœur de la théorie de Moore-Aronszajn permet à la fois de caractériser un RKHS à partir de son n.r. mais aussi de caractériser les n.r. sur un ensemble X quelconque.

Théorème 2 (de Moore-Aronszajn [Aronszajn, 1950]). *L'application qui à H RKHS associe son n.r. K est une bijection de l'ensemble des RKHS sur X dans l'espace des fonctions symétriques de type positif sur X .*

Preuve. Pour une preuve détaillée, on pourra consulter [Aronszajn, 1950] et [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004]. Nous donnons seulement les grandes lignes.

1. (Injectivité) Soient H_1 et H_2 deux RKHS de n.r. K_1 et K_2 tels que $K_1 = K_2$. On pose $K := K_1 = K_2$ et $\mathcal{H}_1 := \text{Vect} \{K(\cdot, x), x \in X\}$. D'après ce qui précède, \mathcal{H}_1 est un sous-espace dense à la fois dans H_1 et H_2 . De plus, $(\cdot, \cdot)_{H_1} = (\cdot, \cdot)_{H_2}$ sur \mathcal{H}_1 par la propriété de reproduction. Par densité et propriété 4 de la Définition 1, on en déduit $H_1 = H_2$ comme sous-espaces de \mathbb{R}^X et aussi $(\cdot, \cdot)_{H_1} = (\cdot, \cdot)_{H_2}$.
2. (Surjectivité) Soit K une fonction symétrique de type positif. On considère à nouveau

$$\mathcal{H}_1 := \text{Vect} \{K(\cdot, x), x \in X\} \subset \mathbb{R}^X.$$

On définit $(f, g)_{\mathcal{H}_1} = \sum_{i,j \in I \times J} \alpha_i \beta_j K(y_j, x_i)$ si $f = \sum_{i \in I} \alpha_i K(\cdot, x_i)$ et $g = \sum_{j \in J} \beta_j K(\cdot, y_j)$. Comme $(f, g)_{\mathcal{H}_1} = \sum_{i \in I} \alpha_i g(x_i) = \sum_{j \in J} \beta_j f(y_j)$, la définition précédente est correcte car indépendante des décompositions de f et g . L'application $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}_1}$ est clairement bilinéaire symétrique et

$$(f, f)_{\mathcal{H}_1} = \sum_{i,j \in I} \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \geq 0,$$

puisque K est de type positif. En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz à la forme bilinéaire symétrique positive $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}_1}$, on obtient :

$$|f(x)| = |(f, K(\cdot, x))_{\mathcal{H}_1}| \leq \sqrt{(f, f)_{\mathcal{H}_1}} \times \sqrt{K(x, x)}. \quad (2.2)$$

Donc, $(f, f)_{\mathcal{H}_1} = 0$ implique $f = 0$ dans \mathbb{R}^X . Ainsi, $(\mathcal{H}_1, (\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}_1})$ est un espace préhilbertien et l'inégalité (2.2) montre encore que les fonctionnelles d'évaluation δ_x sont continues sur \mathcal{H}_1 . Cette propriété permet de compléter \mathcal{H}_1 dans l'espace topologique \mathbb{R}^X tout en satisfaisant la propriété de reproduction :

$$f(x) = (f, K(\cdot, x))_H,$$

en notant H le complété de \mathcal{H}_1 . Ainsi, H est un RKHS de n.r. K , ce qu'il fallait établir. □

Ce théorème a une conséquence immédiate dans la mesure où l'espace des fonctions symétriques de type positif est un cône convexe. La bijection établie précédemment permet de définir par transposition les opérations $\lambda.H$ et $H_1 + H_2$, $\lambda \geq 0$, H , H_1 et H_2 étant des RKHS.

Produit d'un noyau par un scalaire positif. Soient K le noyau reproduisant d'un RKHS H et λ un scalaire positif. Alors, λK est le noyau reproduisant associé à $\lambda.H$ où $\lambda.H = H$ en tant qu'espace, et où

$$(h_1, h_2)_{\lambda.H} = \frac{1}{\lambda} (h_1, h_2)_H.$$

Preuve. $(\cdot, \cdot)_{\lambda.H}$ définit un nouveau produit scalaire sur H (pour lequel H est encore un Hilbert) et

$$h(x) = (h, K(\cdot, x))_H = \frac{1}{\lambda} (h, \lambda K(\cdot, x))_H = (h, \lambda K(\cdot, x))_{\lambda.H},$$

ce qui prouve le résultat. □

Somme de deux noyaux reproduisants. Soient K_1 et K_2 deux noyaux reproduisants associés aux RKHS H_1 et H_2 respectivement. Alors, $K_1 + K_2$ est un noyau reproduisant associé à l'espace de Hilbert $H_1 + H_2$ où $H_1 + H_2 = \{h \in \mathbb{R}^X : h = h_1 + h_2, h_1 \in H_1 \text{ et } h_2 \in H_2\}$ de norme vérifiant

$$\|h\|_H^2 = \min_{h=h_1+h_2} (\|h_1\|_{H_1}^2 + \|h_2\|_{H_2}^2, h_1 \in H_1, h_2 \in H_2).$$

Par ailleurs, on peut montrer que le produit de deux noyaux est encore un noyau, ce qui conduit à :

Produit de deux noyaux reproduisants. Soient K_1 et K_2 deux noyaux reproduisants associés à H_1 et H_2 respectivement alors $K_1 K_2$ est un noyau reproduisant associé au produit tensoriel d'espaces de Hilbert $H_1 \otimes H_2$. Les fonctions de base de l'espace $H_1 \otimes H_2$ sont de la forme

$$f(\cdot) = \sum_{i \in I} \alpha_i K_1(\cdot, x_i) K_2(\cdot, x_i) \in H_1 \otimes H_2.$$

De plus, $(f, g)_{H_1 \otimes H_2} = \sum_{i, j \in I \times J} \alpha_i \beta_j K_1(x_i, y_j) K_2(x_i, y_j)$ pour

$$\begin{aligned} f(\cdot) &= \sum_{i \in I} \alpha_i K_1(\cdot, x_i) K_2(\cdot, x_i) \in H_1 \otimes H_2 \\ g(\cdot) &= \sum_{j \in J} \beta_j K_1(\cdot, y_j) K_2(\cdot, y_j) \in H_1 \otimes H_2 \end{aligned}$$

où I et J sont finis.

Exemple 1 (de RKHS). Soient $X = [0, 1]$ et

$$H_0^1 := \left\{ h \in \mathbb{R}^X, h(x) = \int_0^x h'(t) dt, h' \in L^2(dt) \right\}.$$

On munit cet espace du produit scalaire $(h_1, h_2)_{H_0^1} = \int_0^1 h_1'(t) h_2'(t) dt$. Alors, H_0^1 est un espace de Hilbert. De plus, pour tout $x \in X$, on a

$$h(x) = \int_0^x h'(t) dt = \int_0^1 \mathbb{1}_{[0, x]}(t) h'(t) dt = (h, K(\cdot, x))_{H_0^1},$$

où $K(x', x) = \int_0^{x'} \mathbb{1}_{[0, x]}(t) dt = \min(x', x)$. Ainsi, H_0^1 est un RKHS de noyau reproduisant $K(x', x) = \min(x', x)$, (cf. Définition 2).

2.3 Sous-espaces hilbertiens et noyaux associés

La notion de RKHS sur X peut être insuffisante. Dans certaines applications, les fonctions que l'on considère ont des propriétés spécifiques. Un cas classique est celui de l'espace $E = \mathcal{C}^0(X)$ des fonctions continues sur X en supposant X muni d'une structure topologique. Ainsi, on est amené à considérer H espace de Hilbert comme sous-espace topologique de $E = \mathcal{C}^0(X)$ et non pas de \mathbb{R}^X . Dans toute la suite, on se donne un espace de Banach E (espace vectoriel normé complet) contenu dans \mathbb{R}^X . La situation plus générale E espace vectoriel topologique localement convexe est étudiée en détails dans [Schwartz, 1964].

Définition 3. H est un sous-espace hilbertien de $E \subset \mathbb{R}^X$ si H est un espace de Hilbert contenu dans E tel que l'injection canonique i_H de H dans E soit continue. On notera $\text{Hilb}(E)$ l'ensemble des sous-espaces hilbertiens de E .

Caractérisation d'un sous-espace hilbertien. Soit H un espace de Hilbert contenu dans E . Alors,

$$H \in \text{Hilb}(E) \quad \Leftrightarrow \quad \exists c \geq 0, \forall h \in H, \|h\|_E \leq c\|h\|_H.$$

Soit $\mu \in E'$. Alors, l'application $\mu|_H : H \rightarrow E \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $\mu|_H = \mu \circ i_H \in H'$. Du théorème de représentation de Riesz (cf. Théorème 1), on déduit l'existence et l'unicité de $T_H\mu \in H$ tel que

$$\forall h \in H, \quad \mu(h) = (h, \mu)_{E, E'} = (h, T_H\mu)_H.$$

Ainsi, on peut associer à $H \in \text{Hilb}(E)$ un unique opérateur T_H de E' dans E vérifiant une propriété de reproduction plus générale que (2.1) :

$$\forall \mu \in E', \forall h \in H, \quad \mu(h) = (h, \mu)_{E, E'} = (h, T_H\mu)_H.$$

On appellera encore noyau reproduisant l'opérateur T_H associé à H .

Propriétés du noyau reproduisant

1. $T_H : E' \rightarrow H \subset E$ est un opérateur *symétrique* :

$$\forall \mu_1, \mu_2 \in E', \quad (T_H\mu_1, \mu_2)_{E, E'} = (T_H\mu_2, \mu_1)_{E, E'}.$$

2. T_H est un opérateur *positif* au sens où $\forall \mu \in E', (T_H\mu, \mu)_{E, E'} \geq 0$.

A nouveau, on a une bijection naturelle entre $\text{Hilb}(E)$ et l'ensemble des opérateurs symétriques positifs de E' dans E , que l'on notera $\mathcal{L}^+(E)$.

Théorème 3 ([Schwartz, 1964]). *L'application de $\text{Hilb}(E)$ dans $\mathcal{L}^+(E)$ qui à H associe T_H est une bijection.*

Preuve. Voir [Schwartz, 1964]. □

Lien avec les RKHS. Soit E un espace de Banach contenu dans \mathbb{R}^X . On fait l'hypothèse que les fonctionnelles d'évaluation δ_x sont dans E' . Alors, tout sous-espace hilbertien de E est un RKHS de noyau :

$$K_x(\cdot) = K(\cdot, x) = T_H(\delta_x).$$

Retour sur l'Exemple 1. Soit $E = \mathcal{C}^0(X)$ l'espace des fonctions continues sur $X = [0, 1]$ que l'on munit de la norme uniforme $\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$. Si $h \in H_0^1$, on a

$$\|h\|_\infty \leq c \|h\|_{H_0^1}, \quad \text{avec } c = \sup_{x \in X} \sqrt{K(x, x)} = 1,$$

ce qui prouve $H_0^1 \in \text{Hilb}(E)$ d'après la caractérisation précédente.

Un résultat classique d'analyse fonctionnelle établit que le dual topologique E' de E est constitué de l'ensemble des mesures μ signées bornées sur X [Anger and Portenier, 1992]. De plus, si $f \in E$ et $\mu \in E'$, on a

$$(f, \mu)_{E, E'} = \int_0^1 f(x) d\mu(x).$$

Soient $\mu \in E'$ et $h \in H_0^1$. Par le théorème de Fubini, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mu(h) &= \int_0^1 h(x) d\mu(x) = \int_0^1 \left(\int_0^x h'(t) dt \right) d\mu(x) = \int_0^1 \left(\int_0^1 \mathbb{1}_{[0, x]}(t) d\mu(x) \right) h'(t) dt \\ &= \int_0^1 \left(\int_0^1 \mathbb{1}_{[t, 1]}(x) d\mu(x) \right) h'(t) dt = \int_0^1 \mu([t, 1]) h'(t) dt = (h, T_H \mu)_{H_0^1}. \end{aligned}$$

Ce calcul montre que H_0^1 est dans $\text{Hilb}(E)$ de noyau

$$T_H \mu : x \in X \longrightarrow \int_0^x \mu([t, 1]) dt = \int_0^1 \min(t, x) d\mu(t).$$

Dans le cas particulier où $\mu = \delta_x$ (masse de Dirac au point x), on retrouve

$$K(x', x) = T_H \delta_x(x') = \min(x', x).$$

2.4 Processus aléatoires et fonctions de covariance

2.4.1 Définitions et notations

On considère un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et un espace métrique S muni de sa tribu borélienne, notée $\mathcal{B}(S)$, c'est-à-dire la plus petite σ -algèbre qui contienne tous les

ouverts de S . $(S, \mathcal{B}(S))$ est appelé espace d'état.

On appelle variable aléatoire (à valeurs dans S) toute application mesurable $Y : (\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}) \rightarrow (S, \mathcal{B}(S))$. Dans le cas où $(S, \mathcal{B}(S)) = (\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$, on parle de vecteur aléatoire réel ou de variable aléatoire réelle (v.a.r.) si $d = 1$. On note alors $\mathbb{E}(Y)$ l'espérance de Y lorsque $\mathbb{E}(|Y|) < +\infty$:

$$\mathbb{E}(Y) = \int_{\Omega} Y(\omega) d\mathbb{P}(\omega) = \int Y d\mathbb{P}.$$

La v.a.r. Y est dite centrée si son espérance est nulle (i.e. $\mathbb{E}(Y) = 0$). Pour $p \geq 1$, on note $L^p(\mathbb{P})$ ¹ l'espace des v.a.r. telles que $\mathbb{E}(|Y|^p) < +\infty$. Dans le cas particulier $p = 2$, $L^2(\mathbb{P})$ est un espace de Hilbert, espace des variables aléatoires de carré intégrable (i.e. $\mathbb{E}(Y^2) < +\infty$). La covariance entre $Y_1, Y_2 \in L^2(\mathbb{P})$ est définie par :

$$\text{Cov}(Y_1, Y_2) = \mathbb{E}((Y_1 - \mathbb{E}(Y_1))(Y_2 - \mathbb{E}(Y_2))) = \mathbb{E}(Y_1 Y_2) - \mathbb{E}(Y_1)\mathbb{E}(Y_2).$$

La variance de $Y \in L^2(\mathbb{P})$ est par définition :

$$\text{Var}(Y) = \text{Cov}(Y, Y) = \mathbb{E}((Y - \mathbb{E}(Y))^2).$$

Pour un vecteur aléatoire réel $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^d$, la covariance (ou matrice des variances-covariances) du vecteur \mathbf{Y} est la matrice symétrique réelle de taille $d \times d$, notée $\text{Cov}(\mathbf{Y})$, dont le terme général est de la forme : $\text{Cov}(Y_i, Y_j)$, $i, j = 1, \dots, d$. Pour tout $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)^\top \in \mathbb{R}^d$, on a

$$\alpha^\top \text{Cov}(\mathbf{Y}) \alpha = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \alpha_i \alpha_j \text{Cov}(Y_i, Y_j) = \text{Var} \left(\sum_{i=1}^d \alpha_i Y_i \right) \geq 0.$$

Cela signifie que la matrice $\text{Cov}(\mathbf{Y})$ est une matrice symétrique positive.

Les vecteurs gaussiens représentent un cas particulier intéressant de vecteurs aléatoires. Une v.a.r. est dite *gaussienne standard*, ou encore de loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$, si elle admet la densité de probabilité $f_{\mathcal{N}(0,1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$. D'une manière plus générale, on dit qu'une variable aléatoire Y est gaussienne s'il existe $m \in \mathbb{R}$, $\sigma \in [0, +\infty[$ et N de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ tels que $Y = m + \sigma N$. Par suite, $Y \in L^2(\mathbb{P})$, de moyenne m et de variance σ^2 . On notera : $Y \sim \mathcal{N}(m, \sigma^2)$. On dit qu'un vecteur aléatoire $\mathbf{N} = (N_1, \dots, N_d)^\top \in \mathbb{R}^d$ est gaussien standard si N_1, \dots, N_d sont indépendantes et de même loi gaussienne $\mathcal{N}(0, 1)$. Comme dans le cas $d = 1$, on dit que \mathbf{Y} est un vecteur gaussien si :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{m} + A\mathbf{N},$$

1. Comme souvent en Intégration, on confond les v.a.r. égales presque partout.

2.4. PROCESSUS ALÉATOIRES ET FONCTIONS DE COVARIANCE

où $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^d$ et $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Dans ce cas, $\mathbb{E}(\mathbf{Y}) = \mathbf{m}$ et $K := \text{Cov}(\mathbf{Y}) = AA^\top$. De plus, lorsque K est inversible \mathbf{Y} admet la densité gaussienne multivariée suivante

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|K|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{m})^\top K^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m})\right), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d,$$

où $|K|$ est le déterminant de la matrice K . On notera $\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}, K)$.

Une propriété remarquable des vecteurs gaussiens concerne le calcul de lois conditionnelles. Si $\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2)^\top$ est un vecteur gaussien tel que :

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix}\right),$$

et K_{22} inversible, alors

$$\mathbf{Y}_1 \mid \mathbf{Y}_2 = \mathbf{y}_2 \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_1 + K_{12}K_{22}^{-1}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{m}_2), K_{11} - K_{12}K_{22}^{-1}K_{21}), \quad (2.3)$$

où \mathbf{y}_2 est une réalisation du vecteur gaussien \mathbf{Y}_2 .

Dans cette écriture, K_{11} et K_{22} représentent respectivement les matrices de covariance des vecteurs gaussiens \mathbf{Y}_1 et \mathbf{Y}_2 . Par ailleurs, $K_{12} = K_{21}^\top$ représente la matrice de covariance entre ces deux vecteurs : $K_{12} = \text{Cov}(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2)$. D'après (2.3), $K_{12} = 0$ implique l'indépendance entre les vecteurs gaussiens \mathbf{Y}_1 et \mathbf{Y}_2 . On dit souvent que la non corrélation (linéaire) est équivalente à l'indépendance pour les composantes (par blocs ou non) d'un vecteur gaussien.

2.4.2 Processus aléatoires

On considère à nouveau X un ensemble arbitraire et $(S, \mathcal{B}(S))$ un espace métrique muni de sa tribu borélienne.

Un processus aléatoire est une famille de variables aléatoires $\{Y(x)\}_{x \in X}$ définies sur le même espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et à valeurs dans $(S, \mathcal{B}(S))$. Lorsque X est un sous-ensemble d'un espace physique multidimensionnel, on utilise la dénomination de champ aléatoire. Un processus (ou encore un champ) aléatoire est en réalité de la forme

$$\{Y(x, \omega), x \in X, \omega \in \Omega\}.$$

On appelle trajectoire ou réalisation d'un processus toute fonction $Y(\cdot, \omega) : x \in X \rightarrow Y(x, \omega) \in S$. Lorsque $Y(x) \in L^2(\mathbb{P})$ pour tout $x \in X$, on parle de processus d'ordre 2 et on définit la fonction de covariance comme l'application $\gamma : (x, x') \in X \times X \rightarrow \gamma(x, x') := \text{Cov}(Y(x), Y(x'))$. Si le processus est centré (i.e. de moyenne nulle), alors

$$\gamma(x, x') = \text{Cov}(Y(x), Y(x')) = \mathbb{E}(Y(x)Y(x')) = (Y(x), Y(x'))_{L^2(\mathbb{P})}.$$

La fonction γ est clairement symétrique. De plus,

$$\sum_{i,j \in I} a_i a_j \gamma(x_i, x_j) = \text{Var} \left(\sum_{i \in I} a_i Y(x_i) \right) = \left\| \sum_{i \in I} a_i Y(x_i) \right\|_{L^2(\mathbb{P})}^2 \geq 0,$$

pour tout choix $a_i \in \mathbb{R}, i \in I$, où I est un ensemble fini d'indices. Ainsi, la fonction de covariance γ est une fonction symétrique de type positif. D'après le Théorème 2, il existe un unique RKHS H de noyau reproduisant $K(x, x') = \gamma(x, x')$. Inversement, à tout RKHS H de \mathbb{R}^X de noyau reproduisant K , on peut associer un processus $Y = \{Y(x, \omega), x \in X, \omega \in \Omega\}$ centré de noyau de covariance

$$\gamma(x, x') = K(x, x').$$

C'est un résultat classique de Probabilité [Doob, 1975].

De plus, on a une isométrie naturelle entre l'espace $L^2(Y) := \overline{\text{Vect} \{Y(x), x \in X\}}^{L^2(\mathbb{P})}$ engendré par le processus Y [Janson, 1997] et H le RKHS de noyau $K(x', x) = \gamma(x', x)$ grâce à la correspondance suivante

$$\begin{aligned} Y(x) \in L^2(Y) &\longrightarrow K(\cdot, x) = \gamma(\cdot, x) \in H, \\ \|Y(x)\|_{L^2(\mathbb{P})}^2 &= \|K(\cdot, x)\|_H^2 \quad (\text{i.e. } \gamma(x, x) = K(x, x)). \end{aligned}$$

2.4.3 Processus Gaussiens (PG)

On suppose ici $(S, \mathcal{B}(S)) = (\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$. Un processus aléatoire $\{Y(x)\}_{x \in X}$ est dit gaussien (ou encore un champ gaussien) si pour tout $x_1, \dots, x_n \in X$, le vecteur aléatoire réel $(Y(x_1), \dots, Y(x_n))^T$ est gaussien. Cela signifie en particulier que la variable aléatoire $Y(x)$ est gaussienne pour tout x . Dans ce cas, le processus gaussien $\{Y(x)\}_{x \in X}$ admet une moyenne $m(x) := \mathbb{E}(Y(x))$ appelée aussi tendance. De plus, il admet une fonction de covariance ou noyau de covariance noté $K(x, x')$ (voir Section 2.4.2). La loi d'un vecteur gaussien étant entièrement déterminée par ses moments d'ordre 2, la moyenne m et la covariance K caractérise la loi du processus Y . On écrira :

$$Y(x) \sim \mathcal{PG}(m(x), K(x, x')), \tag{2.4}$$

pour désigner un tel processus. D'après la Section 2.4.2, la correspondance naturelle entre H RKHS sur X et Y PG centré indexé par X est une bijection.

Lorsque $X = \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$), le processus Y est dit stationnaire à l'ordre 2 si la tendance m est une fonction constante et si :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \text{avec } k : X \longrightarrow \mathbb{R}.$$

Retour sur l'Exemple 1. Dans ce cas, le noyau reproduisant est $K(x, x') = \min(x, x')$. On reconnaît la fonction de covariance du mouvement brownien standard $\{B_x\}_x$ sur $[0, 1]$. C'est le processus gaussien centré associé à $H_0^1 \in \text{Hilb}(E)$ où $E = \mathcal{C}^0[0, 1]$. Signalons que c'est l'unique processus à accroissements indépendants et stationnaires qui soit à trajectoires continues et qui démarrent de 0 (unicité à un coefficient multiplicatif σ près). Sur la Figure 1, on montre deux réalisations du mouvement brownien (sur $[0, 1]$).

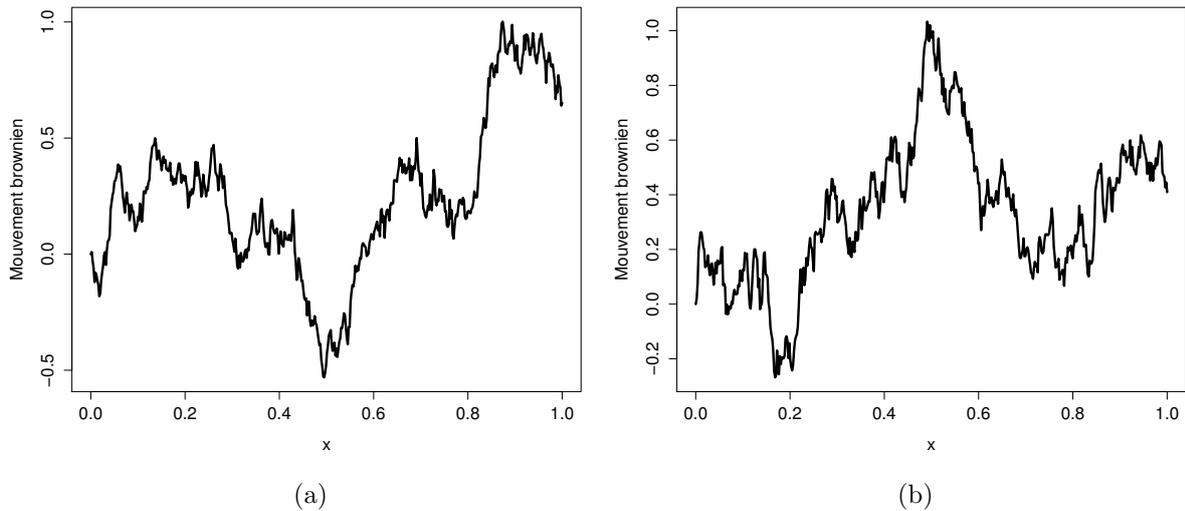


FIGURE 1 – Deux trajectoires simulées du mouvement brownien sur $[0, 1]$.

2.5 Équivalence krigeage et interpolation optimale

2.5.1 Interpolation optimale dans un RKHS

Soit $H \subset \mathbb{R}^X$ un RKHS de noyau reproduisant K sur un ensemble X quelconque. On se fixe un jeu de données $(x^{(i)}, y_i)$, $i = 1, \dots, n$ où les $x^{(i)}$ sont n points d'observation distincts dans l'espace X (espace d'entrée) et où $y_i \in \mathbb{R}$. On note

$$I := \{h \in H : h(x^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n\}$$

l'espace des fonctions interpolantes dans H . En supposant $I \neq \emptyset$, on s'intéresse au problème d'optimisation suivant :

$$h_{opt} = \arg \min_{h \in I} \|h\|_H^2. \tag{P}$$

Un tel problème admet une solution unique correspondant à la projection orthogonale du vecteur nul sur le sous-espace affine fermé I (de codimension finie inférieure ou égale

à n). Pour le résoudre, on introduit l'espace nul suivant :

$$H_0 := \{h \in H : h(x^{(i)}) = 0, i = 1, \dots, n\}.$$

Cet espace H_0 est un sous-espace vectoriel fermé de H puisque

$$H_0 = \{h \in H : (h, K(\cdot, x^{(i)}))_H = 0, i = 1, \dots, n\}$$

et, on a simplement :

Lemme 1. $H_0 = H_1^\perp$ et $H = H_0 \oplus H_1$, où $H_1 := \text{Vect} \{K(\cdot, x^{(1)}), \dots, K(\cdot, x^{(n)})\}$.

Pour identifier la fonction optimale h_{opt} , on rappelle le théorème de représentation suivant :

Théorème 4 ([Kimeldorf and Wahba, 1971]). La solution h_{opt} du problème (P) est dans l'espace H_1 , c'est-à-dire $h_{opt} = \lambda_1 K(\cdot, x^{(1)}) + \dots + \lambda_n K(\cdot, x^{(n)})$, avec $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ dans \mathbb{R} .

Preuve. D'après le Lemme 1, écrivons que $h_{opt} = h_0 + h_1$ avec $h_0 \in H_0$ et $h_1 \in H_1$. Comme $\|h_{opt}\|_H^2 = \|h_0\|_H^2 + \|h_1\|_H^2$, on en déduit que

$$\|h_1\|_H^2 \leq \|h_{opt}\|_H^2.$$

Par ailleurs, $y_i = h_{opt}(x^{(i)}) = h_1(x^{(i)})$ puisque $h_0(x^{(i)}) = 0, \forall i = 1, \dots, n$. Ainsi, h_1 est une fonction interpolante et de norme inférieure à celle de h_{opt} , donc $h_{opt} = h_1 \in H_1$ par unicité de la projection. □

Soit $\mathbb{K} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matrice définie par $\mathbb{K} := (K(x^{(i)}, x^{(j)}))_{i,j}, i, j = 1, \dots, n$ et $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top \in \mathbb{R}^n$.

Corollaire 1. La solution h_{opt} du problème (P) s'écrit sous la forme

$$h_{opt} = \sum_{i=1}^n \lambda_i K(\cdot, x^{(i)}),$$

où $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ est (une) solution du système linéaire suivant : $\mathbb{K}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$.

Preuve. D'après le Théorème 4, il existe $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^n$ tel que $h_{opt} = \sum_{i=1}^n \lambda_i K(\cdot, x^{(i)})$. Pour identifier les coefficients λ_i , il suffit de traduire les n équations d'interpolation : $\sum_{i=1}^n \lambda_i K(x^{(j)}, x^{(i)}) = y_j$ pour tout $j = 1, \dots, n$, ce qui est équivalent à $\mathbb{K}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$. □

2.5. ÉQUIVALENCE KRIGEAGE ET INTERPOLATION OPTIMALE

Ainsi, le problème (P) se ramène à la résolution du système linéaire d'ordre n : $\mathbb{K}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$. Dans toute la suite (sauf mention du contraire), on supposera la matrice \mathbb{K} inversible. Dans ce cas, on peut aussi écrire h_{opt} sous la forme

$$h_{opt}(x) = \mathbf{y}^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x), \quad x \in X, \quad (2.5)$$

où $\mathbf{k}(x) := (K(x, x^{(1)}), \dots, K(x, x^{(n)}))^\top$.

Corollaire 2. Dans la décomposition $H = H_0 \oplus H_1$, H_0 et H_1 sont des RKHS (pour le produit scalaire induit par H) de noyaux reproduisants respectifs K_0 et K_1 avec :

$$\begin{aligned} K_1(x, x') &= \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x'), \\ K_0(x, x') &= K(x, x') - K_1(x, x') = K(x, x') - \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x'). \end{aligned}$$

De plus, $K(\cdot, x) = K_0(\cdot, x) + K_1(\cdot, x)$ correspond à la décomposition orthogonale de $K(\cdot, x)$ selon $H = H_0 \oplus H_1$.

Preuve. Si $h \in H_1$, on a directement d'après ce qui précède

$$h(x) = \mathbf{y}^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x),$$

où $\mathbf{y} = (h(x^{(1)}), \dots, h(x^{(n)}))^\top = ((h, K(\cdot, x^{(1)}))_H, \dots, (h, K(\cdot, x^{(n)}))_H)^\top$. De là,

$$h(x) = (h, K_1(\cdot, x))_H \quad \text{où } K_1(\cdot, x) = \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(\cdot) \in H_1.$$

Soit maintenant $h \in H_0$. Écrivons $h(x) = (h, K(\cdot, x))_H = (h, K_1(\cdot, x) + K(\cdot, x) - K_1(\cdot, x))_H$. Puisque, $K_1(\cdot, x) \in H_1$ et $h \in H_0 = H_1^\perp$, on a

$$h(x) = (h, K_0(\cdot, x))_H, \quad \text{où } K_0(\cdot, x) := K(\cdot, x) - K_1(\cdot, x).$$

Pour conclure, on vérifie que $K_1(x^{(i)}, x) = K(x^{(i)}, x)$ à partir de l'expression obtenue de K_1 , ce qui prouve que $K_0(x^{(i)}, x) = 0$ pour tout i , soit $K_0(\cdot, x) \in H_0$. \square

2.5.2 Correspondance entre régression par processus gaussien et interpolation optimale dans un RKHS

Soit $Y = (Y(x))_{x \in X}$ le processus gaussien centré indexé par X et associé à un RKHS H sur X de n.r. K (cf. Section 2.4.3). Le problème de Régression par Processus Gaussien (RPG) ou de krigeage est de déterminer la loi conditionnelle du processus $Y(x)$ sachant $Y(x^{(1)}) = y_1, \dots, Y(x^{(n)}) = y_n$. Le processus conditionnel en question est encore un PG [Rasmussen and Williams, 2005] :

- de moyenne (dite *moyenne de krigeage*)

$$m(x) := \mathbb{E} (Y(x) \mid Y(x^{(1)}) = y_1, \dots, Y(x^{(n)}) = y_n) = \mathbf{y}^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x) \quad (2.6)$$

- de covariance (conditionnelle)

$$\begin{aligned} \gamma_0(x, x') &:= \text{Cov} (Y(x), Y(x') \mid Y(x^{(1)}) = y_1, \dots, Y(x^{(n)}) = y_n) \\ &= K_0(x, x') = K(x, x') - \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{k}(x') \end{aligned} \quad (2.7)$$

où $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$, $\mathbb{K} = (K(x^{(i)}, x^{(j)}))_{i,j}$ et $\mathbf{k}(x) = (K(x, x^{(1)}), \dots, K(x, x^{(n)}))^\top$.

Ces résultats peuvent être obtenus en appliquant l'équation (2.3) avec $Y_1 = Y(x)$ et le vecteur Y_2 égal au vecteur d'observation $(Y(x^{(1)}), \dots, Y(x^{(n)}))^\top = (y_1, \dots, y_n)^\top$.

D'après l'expression (2.5), on remarque que la moyenne de krigeage coïncide avec la spline d'interpolation (i.e. $h_{opt} = m$, voir Section 2.5.1), ce qui établit une correspondance naturelle entre RPG et interpolation optimale dans un RKHS (voir aussi [Kimeldorf and Wahba, 1971], [Marcotte and David, 1988] et [Matheron, 1981]).

La moyenne de krigeage est une combinaison linéaire des fonctions $K(\cdot, x^{(i)})$, i.e. $m \in H_1$. D'un autre côté, pour tout $x \in X$, $m(x)$ est une combinaison linéaire des observations $Y(x^{(i)}) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. Cette fonction est à la fois l'interpolateur optimal dans le RKHS et le meilleur prédicteur linéaire (sans biais) de $Y(x)$ sachant $Y(x^{(i)}) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. De plus, la covariance conditionnelle correspond au noyau reproduisant de l'espace de Hilbert H_0 (cf. Section 2.5.2). Dans un cadre bayésien, la variance conditionnelle $\gamma_0(x, x)$ permet de calculer un intervalle de prédiction en chaque point.

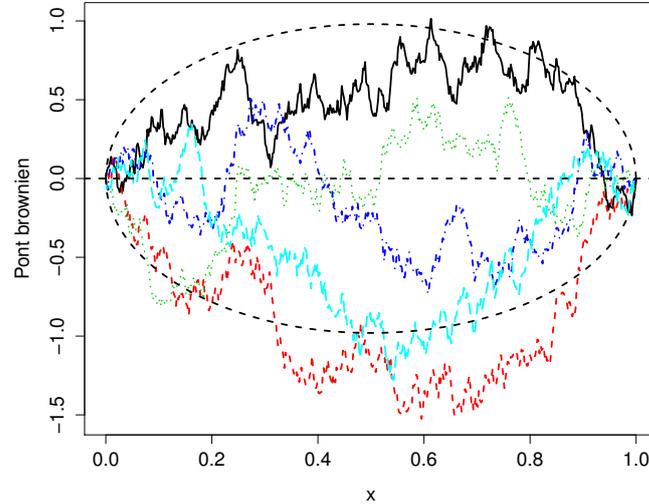
Exemple du pont brownien. Nous reprenons l'Exemple 1, où $H = H_0^1$ est le RKHS associé à la fonction de covariance $K(x, x') = \min(x, x')$ du mouvement brownien standard. Le pont brownien, noté $\{P_x\}_{0 \leq x \leq 1}$, est défini comme le mouvement brownien standard conditionné par le fait que $B_1 = 0$. Il admet le noyau de covariance suivant :

$$K_0(x, x') := \text{Cov}(P_x, P_{x'}) = \min(x, x') \times (1 - \max(x, x')), \quad x, x' \in [0, 1].$$

Pour retrouver ce résultat, il suffit d'appliquer le résultat précédent avec $n = 1$, $x^{(1)} = 1$ et $y_1 = 0$:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(B_x, B_{x'} \mid B_1 = 0) &= K(x, x') - K(x, 1) \frac{1}{K(1, 1)} K(x', 1) \\ &= \min(x, x') - xx' = \min(x, x') \times (1 - \max(x, x')) = K_0(x, x'). \end{aligned}$$

De plus, le pont brownien est un processus centré de variance $\text{Var}(P_x) = K_0(x, x) = x(1 - x)$. Sur la Figure 2, sont représentées cinq réalisations du pont brownien sur $[0, 1]$. Les deux courbes en pointillés correspondent à l'intervalle de prédiction ponctuel au niveau de confiance 95% ($\pm 1.96 \times \sqrt{x(1 - x)}$).

FIGURE 2 – Trajectoires simulées du pont brownien sur $[0, 1]$ et prédiction.

2.6 Choix du noyau

La fonction de covariance (ou noyau reproduisant pour le RKHS associé) est caractérisée par le fait qu'il s'agit d'une fonction symétrique de type positif. Dans le cas où $X = \mathbb{R}$, l'exemple typique d'une telle fonction est le noyau gaussien (stationnaire) suivant :

$$K_g(x, x') = \sigma^2 \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\theta^2}\right), \quad (2.8)$$

où σ est un paramètre d'échelle et θ un paramètre de portée. Ces paramètres sont souvent estimés par deux méthodes classiques : Estimation par Maximum de Vraisemblance (EMV) (voir [Santner et al., 2003]) et technique de Validation Croisée (VC) (voir [Cressie, 1993]). Ce choix de noyau conduit à des fonctions de classe C^∞ pour les trajectoires du processus associé. Pour le noyau exponentiel défini par :

$$K_e(x, x') = \sigma^2 \exp\left(-\frac{|x - x'|}{\theta}\right),$$

les trajectoires du processus ne sont pas dérivables mais seulement continues (régularité de classe C^0). Les noyaux usuels sont définis dans la Table 2.1 et sont classés par ordre de régularité. Si l'on revient à la propriété de stationnarité, on remarque qu'ils sont tous associés à des processus stationnaires. Sur la Figure 3, on représente quelques noyaux classiques et des réalisations du processus gaussien associé. Le paramètre de portée θ est fixé égal à 0.3 et celui d'échelle σ à 1 pour les trois exemples.

TABLE 2.1 – Noyaux de covariance usuels pour la modélisation par processus gaussien.

Nom	Expression	Classe
Gaussien $K_g(x, y)$	$\sigma^2 \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{2\theta^2}\right)$	\mathcal{C}^∞
Matérn 5/2 $K_{m_{\frac{5}{2}}}(x, y)$	$\sigma^2 \left(1 + \frac{\sqrt{5} x-y }{\theta} + \frac{5(x-y)^2}{3\theta^2}\right) \exp\left(-\sqrt{5}\frac{ x-y }{\theta}\right)$	\mathcal{C}^2
Matérn 3/2 $K_{m_{\frac{3}{2}}}(x, y)$	$\sigma^2 \left(1 + \frac{\sqrt{3} x-y }{\theta}\right) \exp\left(-\sqrt{3}\frac{ x-y }{\theta}\right)$	\mathcal{C}^1
Exponentiel $K_e(x, y)$	$\sigma^2 \exp\left(-\frac{ x-y }{\theta}\right)$	\mathcal{C}^0

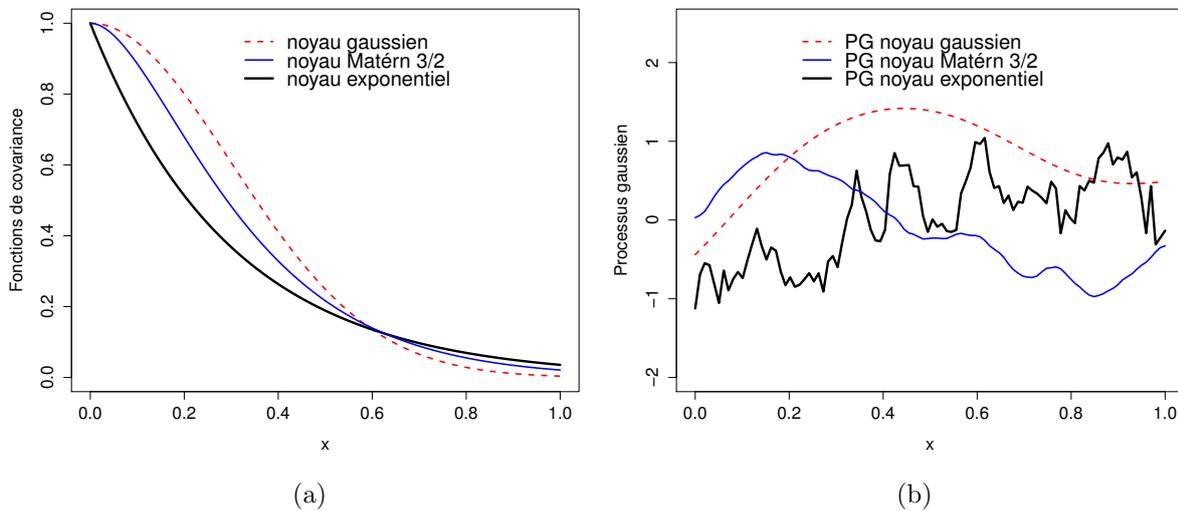


FIGURE 3 – Fonctions de covariance classiques Figure 3a et une réalisation du processus gaussien associé Figure 3b. Les paramètres sont fixés à $(\sigma^2, \theta) = (1, 0.3)$.

2.7. EXTENSION À DES CONTRAINTES LINÉAIRES DE TYPE INÉGALITÉ

Dans le cas multidimensionnel où les variables d'entrée sont des vecteurs de \mathbb{R}^d , ces noyaux peuvent se généraliser simplement à partir de produits tensoriels de noyaux unidimensionnels, par exemple :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^d K_i(x_i, y_i). \quad (2.9)$$

où $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^\top \in \mathbb{R}^d$ et $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_d)^\top \in \mathbb{R}^d$.

2.7 Extension à des contraintes linéaires de type inégalité

Dans certaines applications, des informations *a priori* de type inégalité (e.g. bornes sur les valeurs de la fonction, monotonie croissante ou décroissante et convexité) sont souvent disponibles. En conception automobile par exemple, les dimensions des pièces x_i du véhicule (en entrée) et sa masse y présentent des relations de monotonie. En physique nucléaire, des chercheurs ont étudiés la réactivité neutronique d'une sphère d'uranium, modélisant l'expérience Godiva, réalisée dans les années 50 au laboratoire de Los Alamos au Nouveau-Mexique (https://en.wikipedia.org/wiki/Godiva_device). Physiquement, le comportement de la réactivité neutronique de la sphère est nécessairement croissant selon les deux paramètres considérés : le rayon (entre 0 et 20 cm) et la densité massique (entre 10 et 20 g/cm³) de l'uranium. Dans le domaine de l'assurance (actuariat), le facteur d'actualisation comme fonction de la maturité est *a priori* une fonction décroissante, qui démarre de 1 et qui tend vers 0. Dans de telles situations, la régression par processus décrite dans la Section 2.5.2 ne tient pas compte de ces informations.

Dans les deux approches (RKHS ou krigeage), il est souhaitable d'intégrer de telles contraintes linéaires dans le problème d'interpolation (cf. Figure 4 dans le cas où la fonction à interpoler varie entre 0 et 1). Dans l'approche probabiliste, l'intégration de ces contraintes de type inégalité conduit à un processus conditionnel qui n'est plus un PG mais un processus gaussien 'tronqué'. La plupart des méthodes développées dans la littérature sont basées sur l'intégration de contraintes inégalité faisant intervenir un nombre fini de points de l'espace d'entrée (points de contrôle), voir par exemple l'article [Riihimaki and Vehtari, 2010] pour le cas sans condition d'interpolation et aussi les articles [Golchi et al., 2015] et [Da Veiga and Marrel, 2012] pour le cas mixte. Dans l'approche purement fonctionnelle, la difficulté est encore liée aux contraintes inégalité. A nouveau, l'intégration d'un nombre fini de contraintes inégalité a été considérée, voir par exemple les articles [Dubrule and Kostov, 1986] et [Kostov and Dubrule, 1986] pour une application industrielle. Dans ce cas simple d'un nombre fini de contraintes inégalité, le lien avec le krigeage a été établi et peut être vu comme une extension du lien décrit dans la Section 2.5.2. Ce résultat [Dubrule and Kostov, 1986] est en liaison avec celui de

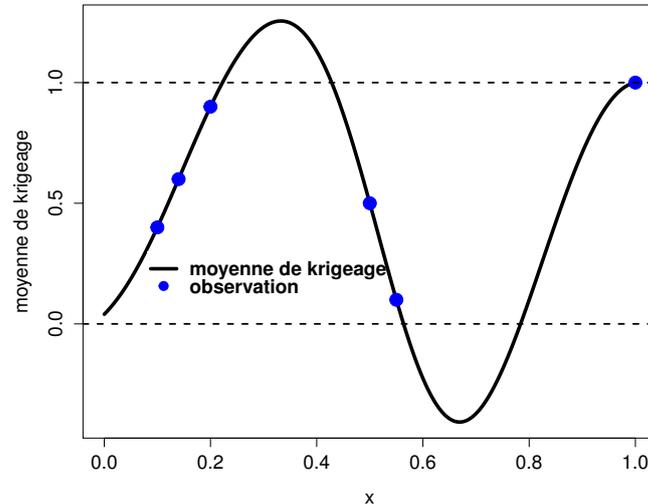


FIGURE 4 – La moyenne de krigeage sous conditions d’interpolation.

[Laurent, 1972] et [Duchon, 1976], où la solution obtenue est appelée spline d’interpolation contrainte (*constrained interpolation spline*). Il a été étendu au cas de semi-noyaux (correspondant à des semi-RKHS) et de noyaux de covariance généraux (stationnaires ou non). Sur un plan théorique, l’intégration de contraintes linéaires de type inégalité conduit dans le cas général à un problème d’optimisation convexe dans l’approche RKHS. La théorie classique de la projection sur un ensemble convexe (fermé) dans un Hilbert garantit l’existence et l’unicité de la spline d’interpolation contrainte comme interpolateur contraint optimal. Dans l’approche probabiliste, l’intégration de telles contraintes est plus difficile sur un plan théorique. On ne dispose pas par exemple de formules analogues à celles du krigeage pour décrire la loi conditionnelle (cf. équations (2.6) et (2.7)). De plus, différents estimateurs peuvent être envisagés dans un cadre bayésien, ce qui soulève la question du choix d’un bon estimateur.

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre, le lien entre l’interpolation optimale dans un RKHS (vision analyse fonctionnelle) et le krigeage (ou la régression par processus gaussien) (vision probabiliste) a été rappelé. Dans certaines applications, des informations supplémentaires sous la forme de contraintes linéaires de type inégalité sont disponibles. Nous rappelons que dans le cas d’un nombre fini de telles contraintes, le calcul et le lien ont été obtenus. Notre travail se situe dans le prolongement de ce résultat. Dans le cas d’un nombre infini de contraintes (monotonie sur tout le domaine par exemple), le lien n’est pas clair jusqu’à

2.8. CONCLUSION

aujourd'hui pour différentes raisons : pas de solution exacte du problème d'optimisation et d'expression analytique de la loi conditionnelle du processus. Dans le Chapitre 3, nous proposons une méthode simple d'approximation pour résoudre le problème de krigeage sous contraintes. Cette méthode consiste à approcher le PG initial $(Y(x))_{x \in X}$ par un PG fini-dimensionnel, i.e. dont les trajectoires sont dans un sous-espace vectoriel de dimension fini de \mathbb{R}^X . Le modèle de régression par PG fini-dimensionnel correspondant est capable d'intégrer à la fois les conditions d'interpolation et les contraintes linéaires de type inégalité. De plus, la vraisemblance comme densité de la loi conditionnelle sur un espace de fonctions (de dimension finie) peut être définie (sans ambiguïté) et le mode (*Maximum A Posteriori*) peut être considéré comme estimateur bayésien classique. Dans le Chapitre 6, la convergence de cet estimateur (MAP) a été établie et la limite identifiée : c'est précisément la solution unique du problème d'interpolation optimale dans le RKHS. C'est la correspondance attendue.

Troisième partie

Régression par processus gaussien sous contraintes linéaires de type inégalité

Chapitre 3

Régression par processus gaussien sous contraintes linéaires de type inégalité

Sommaire

3.1	Introduction	60
3.2	Approximation par processus gaussien fini-dimensionnel	60
3.3	Approximation en dimension 1	61
3.3.1	Contraintes de borne	61
3.3.2	Contrainte de monotonie	63
3.3.3	Contrainte de convexité	66
3.4	Approximation en dimension $d \geq 2$	67
3.5	Simulation d'un processus gaussien sous contraintes	69
3.6	Exemple numérique motivé	72
3.7	Illustration numérique	72
3.7.1	Monotonie en dimension 1	72
3.7.2	Monotonie en dimension 1 avec des trajectoires de classe \mathcal{C}^0	74
3.7.3	Contraintes de borne en dimension 1	76
3.7.4	Convexité en dimension 1	76
3.7.5	Monotonie en dimension 2	77
3.7.6	Convergence numérique	78
3.8	Conclusion	79

3.1 Introduction

Nous proposons dans ce chapitre une méthode simple permettant d'approcher et de résoudre un problème de RPG sous contraintes linéaires de type inégalité (voir Section 2.7, Chapitre 2). Pour cela, on considère $(Y(x))_{x \in X}$ un processus gaussien centré de fonction de covariance $K(x, x')$ où X est un ensemble quelconque. On note encore $(x^{(i)}, y_i)$, $i = 1, \dots, n$ les données d'interpolation et on désigne par C le sous-espace de \mathbb{R}^X correspondant à des informations *a priori* sur la fonction à interpoler. Cet espace, défini par un ensemble de contraintes linéaires de type inégalité, est supposé convexe. Le problème de régression par processus gaussien sous contraintes est de calculer (simuler) la loi conditionnelle du processus gaussien Y sachant :

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{x}^{(i)}) &= y_i, & i = 1, \dots, n, \\ Y &\in C. \end{aligned}$$

3.2 Approximation par processus gaussien fini-dimensionnel

Pour conditionner sous conditions d'interpolation et contraintes inégalité, on propose une approximation Y^N du processus gaussien initial Y , de la forme suivante :

$$Y^N(\mathbf{x}) := \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (3.1)$$

avec $\xi = (\xi_0, \dots, \xi_N)^\top$ un vecteur gaussien centré de matrice de covariance (notée Γ^N) et $\phi = (\phi_0, \dots, \phi_N)^\top$ un vecteur de fonctions de base dans \mathbb{R}^X . Le choix de ces fonctions déterministes ainsi que le choix de la matrice de covariance Γ^N dépendent de la nature des contraintes de type inégalité. La variabilité du processus Y^N vient uniquement des coefficients aléatoires ξ_j . Clairement, le processus Y^N est un processus gaussien centré de fonction de covariance suivante :

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{Cov}(Y^N(\mathbf{x}), Y^N(\mathbf{x}')) = \phi(\mathbf{x})^\top \Gamma^N \phi(\mathbf{x}'),$$

pour $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^d$. L'avantage d'une telle approximation (3.1) est que la simulation du processus gaussien conditionnel est équivalente à simuler le vecteur gaussien ξ sachant les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité suivantes :

$$\sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{x}^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

$$\xi \in C_\xi, \quad (3.3)$$

où $C_\xi = \left\{ \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{N+1} : \sum_{j=0}^N c_j \phi_j \in C \right\}$. Ainsi, le problème de simulation est réduit à simuler un vecteur gaussien tronqué. Dans la suite de ce chapitre, nous allons préciser ce schéma d'approximation sur quelques exemples avant de s'intéresser à sa convergence dans les chapitres 6 et 7. Dans la section suivante, on donne quelques exemples de fonctions de base en dimension 1 associées à des contraintes de natures différentes.

3.3 Approximation en dimension 1

Dans cette section, on suppose que la variable d'entrée x est réelle et, sans perte de généralité, dans l'intervalle unité $[0, 1]$. Le but de cette section est de montrer quelques exemples de fonctions de base en fonction du type de contraintes inégalité ainsi que la forme de la matrice noyau de covariance des coefficients aléatoires. Ces fonctions de base sont choisies pour réduire les contraintes inégalité à un nombre fini de contraintes linéaires sur les coefficients.

3.3.1 Contraintes de borne

Supposons que la fonction à interpoler soit continue et de valeurs comprises entre a et b où $-\infty \leq a < b \leq +\infty$ sont connues de manière explicite. Dans ce cas, l'espace convexe C est le sous-espace :

$$C := \left\{ f \in \mathcal{C}^0([0, 1]), a \leq f(x) \leq b, x \in [0, 1] \right\}.$$

On commence par la construction des fonctions ϕ_j ($j = 0, \dots, N$) qui vont être utilisées. Pour cela, on discrétise l'espace d'entrée : $0 = u_0 < u_1 < \dots < u_N = 1$, par exemple $u_j = j\delta_N = j/N$ pour une discrétisation uniforme. A chaque nœud u_j , on associe une fonction de base

$$h_j(x) = h\left(\frac{x - u_j}{\delta_N}\right), \quad j = 0, \dots, N \quad (3.4)$$

avec $h(x) := (1 - |x|) \mathbf{1}_{|x| \leq 1}$, (voir Figure 5a et Figure 5b pour $N = 4$). Les fonctions h_j sont parfois appelées fonctions 'chapeau' (*hat functions*) et vérifient :

$$\begin{aligned} 0 \leq h_j(x) \leq 1, & \quad x \in [0, 1] \\ \sum_{j=0}^N h_j(x) = 1, & \quad x \in [0, 1] \\ h_j(u_i) = \delta_{i,j}, & \quad i, j = 0, \dots, N \end{aligned}$$

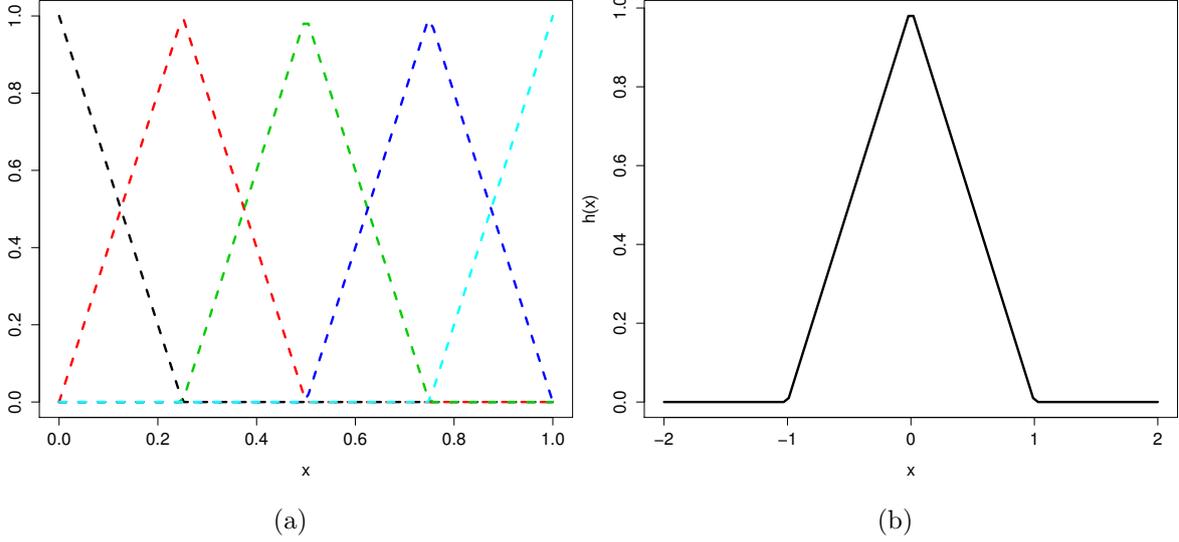


FIGURE 5 – Les fonctions de base h_j , ($0 \leq j \leq 4$) (Figure 5a) et la fonction h (Figure 5b).

où $\delta_{i,j}$ est la fonction de Kronecker égale à 1 si $i = j$ et 0 sinon.

On définit maintenant le processus Y^N .

Proposition 1. *On suppose $(Y(x))_{x \in [0,1]}$ à trajectoires continues. Soit $(Y^N(x))_{x \in [0,1]}$ le processus gaussien défini par*

$$Y^N(x) := \sum_{j=0}^N Y(u_j) h_j(x) = \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x), \quad (3.5)$$

où $\phi_j = h_j$ et $\xi_j = Y(u_j)$, $j = 0, \dots, N$. Alors, on a les propriétés suivantes :

1. Y^N est un PG centré de dimension finie de fonction de covariance $K_N(x, x') = \phi(x)^\top \Gamma^N \phi(x')$ où $\phi(x) = (\phi_0(x), \dots, \phi_N(x))^\top$, $\Gamma_{i,j}^N = K(u_i, u_j)$, $i, j = 0, \dots, N$ et où K est le noyau de covariance du processus gaussien initial Y .
2. Y^N converge uniformément vers Y lorsque N tend vers l'infini (avec probabilité 1).
3. Y^N est dans C si et seulement si les $(N + 1)$ coefficients ξ_j sont dans $[a, b]$.

Par la dernière propriété, l'infinité de contraintes inégalité $\{Y^N \in C\}$ se réduisent à un nombre fini de contraintes sur les coefficients aléatoires ξ_j , $j = 0, \dots, N$. Par suite, le problème de simulation du processus Y^N sous les conditions d'interpolation et les

contraintes inégalité se ramène à simuler un vecteur gaussien ξ tronqué à un sous-espace convexe de \mathbb{R}^{N+1} :

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x^{(i)}) &= y_i, \quad i = 1, \dots, n \\ \xi &\in C_\xi = [a, b]^{N+1} \end{aligned}$$

Preuve de la Proposition 1. La propriété 1 résulte du calcul suivant :

$$\text{Cov}(Y^N(x), Y^N(x')) = \sum_{i,j=0}^N \text{Cov}(Y(u_i), Y(u_j)) \phi_i(x) \phi_j(x') = \sum_{i,j=0}^N K(u_i, u_j) \phi_i(x) \phi_j(x').$$

La propriété 2 est une conséquence de l'hypothèse de continuité des trajectoires du processus Y et de l'inégalité suivante pour f continue sur $[0, 1]$:

$$x \in [0, 1], \quad |f_N(x) - f(x)| \leq \omega(f, \delta_N),$$

où $f_N(x) := \sum_{j=0}^N f(u_j) h_j(x)$ et où $\omega(f, \delta_N) := \sup_{|x-x'| \leq \delta_N} |f(x) - f(x')|$ désigne le module de continuité de f . En effet, on a

$$|f_N(x) - f(x)| = \left| \sum_{j=0}^N (f(u_j) - f(x)) \phi_j(x) \right| \leq \sum_{j=0}^N \omega(f, \delta_N) \phi_j(x) = \omega(f, \delta_N).$$

Enfin, si $Y^N \in C$, alors $\xi_j = Y^N(u_j) \in [a, b]$, $j = 0, \dots, N$. L'autre implication résulte de la relation $\sum_{j=0}^N \phi_j(x) = 1$ et de $\phi_j(x) \geq 0$, $0 \leq j \leq N$, $x \in [0, 1]$. \square

3.3.2 Contrainte de monotonie

Dans cette section, la fonction à interpoler f est supposée de classe au moins \mathcal{C}^1 (espace des fonctions continûment dérivables). Le sous-espace convexe C est l'espace des fonctions monotones croissantes :

$$C := \{f \in \mathcal{C}^1([0, 1]) : f'(x) \geq 0, x \in [0, 1]\}.$$

Les fonctions de base sont définies comme primitives des fonctions chapeau h_j , $j = 0, \dots, N$:

$$\phi_j(x) := \int_0^x h_j(t) dt, \quad x \in [0, 1]. \quad (3.6)$$

Par construction, les fonctions ϕ_j vérifient : $\phi_j'(u_i) = \delta_{ij}$ (fonction de Kronecker). La Figure 6a illustre le cas $N = 4$ (i.e. 5 fonctions de base). Notons que ces fonctions sont

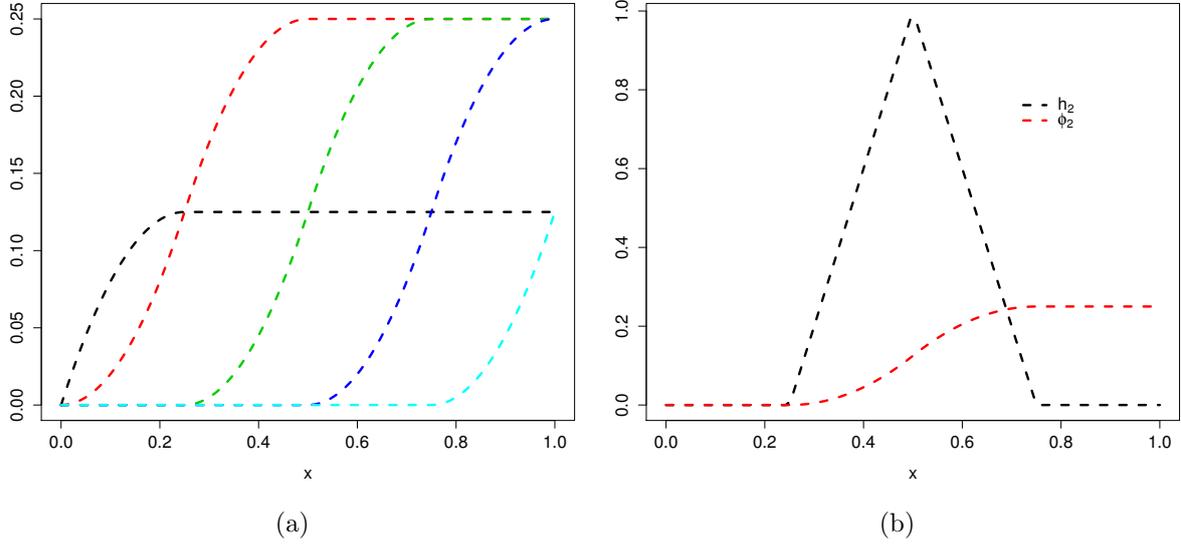


FIGURE 6 – Les fonctions de base ϕ_j , ($0 \leq j \leq N = 4$) (Figure 6a) et la fonction ϕ_2 avec sa dérivée h_2 (Figure 6b).

croissantes et nulles à l'origine. Sur la Figure 6b, on représente la fonction de base ϕ_2 et sa dérivée h_2 .

Comme dans la Proposition 1, on a le résultat suivant :

Proposition 2. *On suppose le processus gaussien Y de trajectoires au moins de classe \mathcal{C}^1 . Soit $(Y^N(x))_{x \in [0,1]}$ le processus gaussien défini par :*

$$Y^N(x) := Y(0) + \sum_{j=0}^N Y'(u_j) \phi_j(x) = \zeta + \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x), \quad (3.7)$$

où $\zeta = Y(0)$ et $\xi_j = Y'(u_j)$, $j = 0, \dots, N$. Alors :

1. Y^N est un PG centré de dimension finie de fonction de covariance

$$K_N(x, x') = (1, \phi_0(x), \dots, \phi_N(x)) \Gamma^N (1, \phi_0(x'), \dots, \phi_N(x'))^\top$$

où Γ^N est la matrice de covariance du vecteur gaussien $(\zeta, \xi) = (Y(0), Y'(u_0), \dots, Y'(u_N))^\top$. De manière explicite, on a :

$$\Gamma^N = \begin{bmatrix} K(0,0) & \frac{\partial K}{\partial x'}(0, u_j) \\ \frac{\partial K}{\partial x}(u_i, 0) & \Gamma_{i,j}^N \end{bmatrix} \quad \text{de taille } (N+2) \times (N+2),$$

avec $\Gamma_{i,j}^N = \frac{\partial^2 K}{\partial x \partial x'}(u_i, u_j)$, $i, j = 0, \dots, N$ et K la fonction de covariance du processus gaussien initial Y .

2. Y^N converge uniformément vers Y lorsque N tend vers l'infini (avec probabilité 1).
3. Y^N est une fonction croissante si et seulement si les coefficients ξ_j , $j = 0, \dots, N$ sont tous positifs.

En utilisant la dernière propriété, la simulation du processus Y^N sous les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité est équivalente à simuler le vecteur gaussien (ζ, ξ) restreint à l'espace convexe :

$$\zeta + \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n$$

$$(\zeta, \xi) \in C_\xi = \{(\zeta, \xi) \in \mathbb{R}^{N+2} : \xi_j \geq 0, j = 0, \dots, N\}$$

Preuve de la Proposition 2. Par linéarité de l'opérateur de dérivation, Y' est encore un processus gaussien [Cramér and Leadbetter, 1967] et :

$$\text{Cov}(Y'(x), Y'(x')) = \frac{\partial^2 K}{\partial x \partial x'}(x, x'),$$

$$\text{Cov}(Y(x), Y'(x')) = \frac{\partial K}{\partial x'}(x, x').$$

De là,

$$K_N(x, x') = \text{Cov}(Y^N(x), Y^N(x')) = \text{Var}(Y(0)) + \sum_{i=0}^N \frac{\partial K}{\partial x}(u_i, 0) \phi_i(x)$$

$$+ \sum_{j=0}^N \frac{\partial K}{\partial x'}(0, u_j) \phi_j(x') + \sum_{i,j=0}^N \frac{\partial^2 K}{\partial x \partial x'}(u_i, u_j) \phi_i(x) \phi_j(x').$$

Soit f de classe \mathcal{C}^1 sur $[0, 1]$ et f_N définie par :

$$f_N(x) = f(0) + \sum_{j=0}^N f'(u_j) \phi_j(x).$$

Alors

$$|f_N(x) - f(x)| = \left| \int_0^x f_N'(t) dt - \int_0^x f'(t) dt \right| = \left| \int_0^x (f_N'(t) - f'(t)) dt \right| \leq \|f_N' - f'\|_\infty,$$

3.3. APPROXIMATION EN DIMENSION 1

donc $\|f_N - f\|_\infty \leq \|f'_N - f'\|_\infty$. On conclut comme dans la preuve de la propriété 2 de la Proposition 1. La dernière propriété résulte de l'expression

$$(Y^N)'(x) = \sum_{j=0}^N \xi_j h_j(x)$$

et de la propriété 3 de la Proposition 1. □

Remarque 1 (Monotonie d'une fonction continue pas nécessairement dérivable). Si la fonction à interpoler est continue de classe \mathcal{C}^0 et croissante, alors l'approximation (3.5) définit un processus croissant *si et seulement si* la suite des coefficients ξ_j , $j = 0, \dots, N$ est croissante, $\xi_{j-1} \leq \xi_j$, $j = 1, \dots, N$.

3.3.3 Contrainte de convexité

Dans cette section, la fonction à interpoler est supposée deux fois dérivable. On prend pour fonctions de base :

$$\phi_j(x) := \int_0^x \left(\int_0^t h_j(u) du \right) dt.$$

Ainsi $\phi_j'' = h_j \geq 0$, $\phi_j'(0) = 0$ et $\phi_j(0) = 0$. Sur la Figure 7a, on représente les fonctions de base ϕ_j , ($0 \leq j \leq N = 4$). Toutes ces fonctions sont convexes. Sur la Figure 7b, on représente la fonction de base ϕ_2 et la fonction chapeau associée $h_2 = \phi_2''$.

L'approximation Y^N du processus Y est de la forme :

$$Y^N(x) := Y(0) + xY'(0) + \sum_{j=0}^N Y''(u_j) \phi_j(x) = \zeta + \kappa x + \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x). \quad (3.8)$$

Y^N est convexe *si et seulement si* les $(N + 1)$ coefficients aléatoires $\xi_j = Y''(u_j)$ sont positifs. On a de plus :

$$C_\xi = \{(\zeta, \kappa, \xi) \in \mathbb{R}^{N+3} : \xi_j \geq 0, j = 0, \dots, N\}.$$

La matrice de covariance de taille $(N + 3) \times (N + 3)$ du vecteur gaussien (ζ, κ, ξ) est donnée par

$$\Gamma^N = \begin{bmatrix} \text{Var}(\zeta) & \text{Cov}(\zeta, \kappa) & \text{Cov}(\zeta, \xi) \\ \text{Cov}(\kappa, \zeta) & \text{Var}(\kappa) & \text{Cov}(\kappa, \xi) \\ \text{Cov}(\xi, \zeta) & \text{Cov}(\xi, \kappa) & \text{Cov}(\xi, \xi) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K(0, 0) & \frac{\partial K}{\partial x'}(0, 0) & \frac{\partial^2 K}{\partial (x')^2}(0, u_j) \\ \frac{\partial K}{\partial x}(0, 0) & \frac{\partial^2 K}{\partial x \partial x'}(0, 0) & \frac{\partial^3 K}{\partial x \partial (x')^2}(0, u_j) \\ \frac{\partial^2 K}{\partial x^2}(u_i, 0) & \frac{\partial^3 K}{\partial x^2 \partial x'}(u_i, 0) & \Gamma_{i,j}^N \end{bmatrix},$$

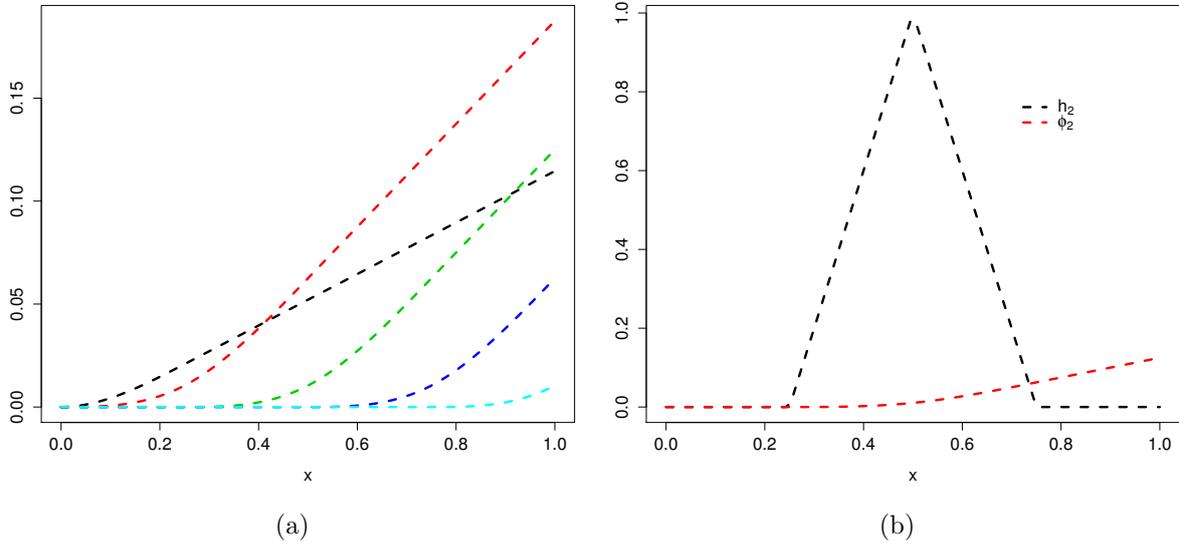


FIGURE 7 – Les fonctions de base ϕ_j , ($0 \leq j \leq N = 4$) (Figure 7a) et ϕ_2 de dérivée seconde h_2 (Figure 7b).

où

$$\Gamma_{i,j}^N = \text{Cov}(\xi_i, \xi_j) = \text{Cov}(Y''(u_i), Y''(u_j)) = \frac{\partial^4 K}{\partial x^2 \partial (x')^2}(u_i, u_j), \quad i, j = 0, \dots, N.$$

(Voir Annexe A pour le calcul des dérivées partielles du noyau gaussien).

3.4 Approximation en dimension $d \geq 2$

On considère le cas multidimensionnel $d \geq 2$. Pour une contrainte de borne, le modèle d'approximation se généralise facilement. Les fonctions de base sont définies comme produits tensoriels de fonctions chapeau. Dans cette section, nous nous intéressons à la monotonie multidimensionnelle, cas important du point de vue des applications.

On suppose d'abord que la variable d'entrée $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in [0, 1]^2$. La fonction à interpoler est supposée monotone croissante par rapport à chaque variable (l'autre variable étant fixée à une valeur arbitraire) :

$$\begin{aligned} \forall x_1, x_2 \leq x'_2 &\Rightarrow f(x_1, x_2) \leq f(x_1, x'_2) \\ \forall x_2, x_1 \leq x'_1 &\Rightarrow f(x_1, x_2) \leq f(x'_1, x_2). \end{aligned}$$

Cela revient à supposer que :

$$x_1 \leq x'_1 \quad \text{et} \quad x_2 \leq x'_2 \quad \Rightarrow \quad f(x_1, x_2) \leq f(x'_1, x'_2).$$

3.4. APPROXIMATION EN DIMENSION $D \geq 2$

L'idée est comme en dimension 1. On construit les fonctions de base de sorte que les contraintes de monotonie sur le processus gaussien fini-dimensionnel soient *équivalentes* à un nombre fini de contraintes sur les coefficients. Pour construire ces fonctions de base, on discrétise l'intervalle $[0, 1]^2$ (e.g. uniformément selon une grille formée de $(N + 1)^2$ nœuds, voir Figure 14 pour $N = 7$). Puis, sur chaque nœud, on construit une fonction de base. Par exemple, la fonction de base associée au nœud (u_i, u_j) est définie par :

$$\Phi_{i,j}(\mathbf{x}) = h_i(x_1)h_j(x_2),$$

où h_j , $j = 0, \dots, N$ sont les fonctions chapeau définies par (3.4). Dans ce cas, on a

$$\Phi_{i,j}(u_k, u_l) = \delta_{i,k}\delta_{j,l}, \quad k, l = 0, \dots, N.$$

Proposition 3. Soit $(Y^N(\mathbf{x}))_{\mathbf{x} \in [0,1]^2}$ le processus gaussien défini par :

$$Y^N(x_1, x_2) := \sum_{i,j=0}^N Y(u_i, u_j)h_i(x_1)h_j(x_2) = \sum_{i,j=0}^N \xi_{i,j}h_i(x_1)h_j(x_2), \quad (3.9)$$

où $\xi_{i,j} = Y(u_i, u_j)$ et les fonctions h_j , $j = 0, \dots, N$ définies par (3.4). Alors, on a :

1. Y^N est un processus gaussien centré de fonction de covariance

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \Phi(\mathbf{x})^\top \Gamma^N \Phi(\mathbf{x}'),$$

où $\Phi(\mathbf{x}) = (\Phi_{i,j}(\mathbf{x}))_{i,j} = (h_i(x_1)h_j(x_2))_{i,j}$, $\Gamma_{(i,j),(i',j')}^N = K((u_i, u_j), (u_{i'}, u_{j'}))$ et K est la fonction de covariance du processus gaussien initial Y .

2. Y^N converge uniformément vers Y lorsque N tend vers l'infini (avec probabilité 1).
3. Y^N est croissante par rapport aux deux variables d'entrée si et seulement si les $(N + 1)^2$ coefficients aléatoires $\xi_{i,j}$, $i, j = 0, \dots, N$ vérifient les contraintes linéaires suivantes :

- (i) $\xi_{i-1,j} \leq \xi_{i,j}$ et $\xi_{i,j-1} \leq \xi_{i,j}$, $i, j = 1, \dots, N$.
- (ii) $\xi_{i-1,0} \leq \xi_{i,0}$, $i = 1, \dots, N$.
- (iii) $\xi_{0,j-1} \leq \xi_{0,j}$, $j = 1, \dots, N$.

Par la dernière propriété, on en déduit encore que le problème de simulation de Y^N sous les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité se réduit à simuler le vecteur gaussien $\xi = (\xi_{i,j})_{i,j}$ tronqué à l'espace convexe :

$$\sum_{i,j=0}^N \xi_{i,j} h_i(x_1^{(k)}) h_j(x_2^{(k)}) = y_k, \quad k = 1, \dots, n$$

$$\xi \in C_\xi = \left\{ \xi \in \mathbb{R}^{(N+1)^2} : \xi_{i,j} \text{ vérifient (i), (ii) et (iii)} \right\}.$$

Preuve de Proposition 3. La preuve des trois premières propriétés est similaire au cas de la dimension 1. Pour l'équivalence, si les $(N + 1)^2$ coefficients aléatoires $\xi_{i,j}$, $i, j = 0, \dots, N$ vérifient les contraintes linéaires (i), (ii) et (iii) alors Y^N est croissante car Y^N est une fonction linéaire par morceaux dans chaque direction x_1 ou x_2 . Si Y^N est croissante par rapport aux deux variables, alors $Y^N(u_i, u_j) = \xi_{i,j}$, $i, j = 0, \dots, N$ vérifient les contraintes (i), (ii) et (iii). □

Remarque 2 (Monotonie par rapport à l'une des deux variables). Si la fonction qu'on cherche à interpoler est croissante par rapport à la première variable par exemple, alors

$$Y^N(x_1, x_2) = \sum_{i,j=0}^N Y(u_i, u_j) h_i(x_1) h_j(x_2) = \sum_{i,j=0}^N \xi_{i,j} h_i(x_1) h_j(x_2),$$

est croissante par rapport à x_1 si et seulement si les coefficients aléatoires vérifient les inégalités suivantes : $\xi_{i-1,j} \leq \xi_{i,j}$, $i = 1, \dots, N$ et $j = 0, \dots, N$.

Le cas multidimensionnel est une simple extension du cas $d = 2$. L'approximation peut s'écrire sous la forme :

$$Y^N(\mathbf{x}) = \sum_{i_1, \dots, i_d=0}^N Y(u_{i_1}, \dots, u_{i_d}) \prod_{\sigma \in \{1, \dots, d\}} h_{i_\sigma}(x_\sigma) = \sum_{i_1, \dots, i_d=0}^N \xi_{i_1, \dots, i_d} \prod_{\sigma \in \{1, \dots, d\}} h_{i_\sigma}(x_\sigma),$$

où $\xi_{i_1, \dots, i_d} = Y(u_{i_1}, \dots, u_{i_d})$. La Remarque 2 se généralise encore, pour la monotonie par rapport à un sous-ensemble de variables d'entrée. Par exemple, la monotonie du processus Y^N par rapport à la $l^{\text{ème}}$ variable d'entrée x_l est équivalent à $\xi_{i_1, \dots, i_{l-1}, \dots, i_d} \leq \xi_{i_1, \dots, i_l, \dots, i_d}$, $i_l = 1, \dots, N$ et $i_1, \dots, i_{l-1}, i_{l+1}, \dots, i_d = 0, \dots, N$.

3.5 Simulation d'un processus gaussien sous conditions d'interpolation et contraintes inégalité

Rappelons que l'approximation par un PG fini-dimensionnel Y^N du processus gaussien Y est de la forme :

$$Y^N(x) = \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

où $\xi = (\xi_0, \dots, \xi_N)^\top$ est un vecteur gaussien de matrice de covariance Γ^N et $\phi = (\phi_0, \dots, \phi_N)^\top$ sont des fonctions de base déterministes. Par exemple, le terme constant

$Y(0)$ dans le modèle (3.7) peut s'écrire comme $\xi_0\phi_0(x)$, où $\phi_0(x) = 1$. On note

$$I_\xi := \left\{ \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{N+1} \text{ tel que } \sum_{j=0}^N c_j \phi_j(\mathbf{x}^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n \right\}$$

et on rappelle que $C_\xi = \left\{ \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{N+1} \text{ tel que } \sum_{j=0}^N c_j \phi_j(x) \in C \right\}$.

Dans cette section, nous sommes intéressés par le calcul de la moyenne (i.e. l'espérance conditionnelle), le mode (*Maximum A Posteriori*) et la variance du processus Y^N conditionnellement au fait que $Y^N \in I \cap C$. Le problème de simulation du processus gaussien Y^N sous les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité revient à simuler le vecteur gaussien $\xi = (\xi_0, \dots, \xi_N)^\top$ tronqué au convexe $I_\xi \cap C_\xi$. Dans ce cas, plusieurs algorithmes peuvent être utilisés (voir e.g. [Botts, 2013], [Chopin, 2011], [Geweke, 1991], [Kotecha and Djuric, 1999], [Maatouk and Bay, 2014], [Philippe and Robert, 2003] et [Robert, 1995]).

Dans la suite, on introduit quelques notations. On note ξ_c la moyenne du vecteur gaussien ξ conditionnelle à $\xi \in I_\xi$ sans tenir compte des contraintes inégalité. Le vecteur conditionnel en question est encore un vecteur gaussien. Par linéarité de l'espérance conditionnelle, la moyenne de krigeage usuelle du processus gaussien fini-dimensionnel Y^N sous les conditions d'interpolation est égale à

$$m_K(x) := \mathbb{E}(Y^N(x) \mid Y^N(\mathbf{x}^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n) = \sum_{j=0}^N (\xi_c)_j \phi_j(x),$$

où $\xi_c = \mathbb{E}(\xi \mid \xi \in I_\xi) \in \mathbb{R}^{N+1}$.

Définition 4. Notons ξ_m la moyenne du vecteur gaussien ξ tronqué à $I_\xi \cap C_\xi$. Alors, la moyenne de krigeage sous les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité est définie par :

$$m_{KI}(x) := \mathbb{E}(Y^N(x) \mid Y^N(\mathbf{x}^{(i)}) = y_i, \xi \in C_\xi) = \sum_{j=0}^N (\xi_m)_j \phi_j(x),$$

où $\xi_m = \mathbb{E}(\xi \mid \xi \in I_\xi \cap C_\xi)$.

Finalement, soit μ le maximum de vraisemblance du vecteur gaussien ξ restreint à $I_\xi \cap C_\xi$. C'est la solution du problème de minimisation convexe suivant :

$$\mu = \arg \min_{\mathbf{c} \in I_\xi \cap C_\xi} \left(\frac{1}{2} \mathbf{c}^\top (\Gamma^N)^{-1} \mathbf{c} \right), \quad (3.10)$$

où Γ^N est la matrice de covariance du vecteur gaussien ξ . En réalité, le vecteur μ correspond au mode du vecteur gaussien ξ tronqué à la zone convexe $I_\xi \cap C_\xi$. Pour calculer numériquement sa valeur, cela revient à résoudre un programme quadratique sous des contraintes convexes, voir e.g. [Boyd and Vandenberghe, 2004] et [Goldfarb and Idnani, 1983].

Définition 5. La fonction appelée mode ou Maximum A Posteriori (MAP) est définie par

$$M_{KI}(x) := \sum_{j=0}^N \mu_j \phi_j(x),$$

où le vecteur $\mu = (\mu_0, \dots, \mu_N)^\top \in \mathbb{R}^{N+1}$ est la solution du problème (3.10).

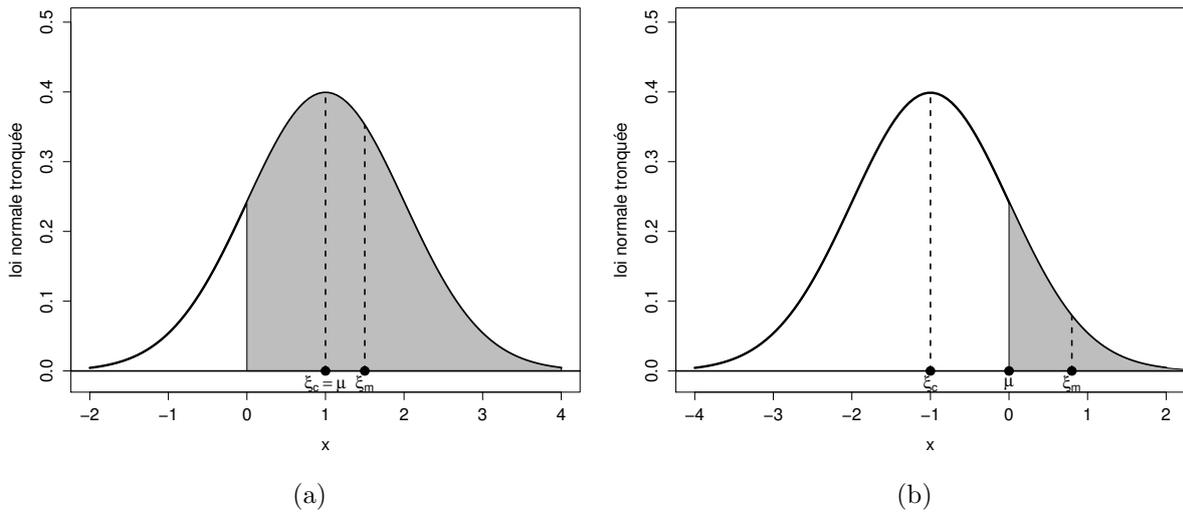


FIGURE 8 – Deux cas de simulation d’une loi normale tronquée. La moyenne est à l’intérieur (resp. à l’extérieur) de la zone d’acceptation Figure 8a (resp. Figure 8b).

En pratique, on distingue deux cas pour la loi multi-normale tronquée (voir Figure 8a et Figure 8b par exemple en dimension 1). Dans le premier cas (Figure 8a), on a $\xi_c = \mu$ et par suite $m_K = M_{KI}$ est différente de m_{KI} . Dans ce cas, ξ_c est à l’intérieur de C_ξ et la moyenne de krigeage usuelle respecte les contraintes inégalité. Le deuxième cas correspond à ξ_c , μ et ξ_m différents (Figure 8b). Dans ce cas, ξ_c est à l’extérieur de C_ξ (la zone d’acceptation) et la moyenne de krigeage usuelle ne respecte pas les contraintes inégalité.

3.6 Exemple numérique motivé

Le but de cette section est d'illustrer la performance du modèle proposé dans ce chapitre en termes de prédiction et d'incertitude. On considère la fonction monotone $f(x) = \log(20x + 1)$ utilisée dans [Golchi et al., 2015] (courbe noire sur la Figure 9). Supposons que f soit évaluée en $X = (0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.9, 1)$. Comme cela a été remarqué dans [Golchi et al., 2015], c'est une situation intéressante dans la mesure où la distance entre les cinquième et sixième observations (i.e. $0.4 < x < 0.9$) est grande. Sur la Figure 9a, les trajectoires en gris représentent les simulations d'un processus gaussien sans contraintes en utilisant le noyau Matérn 5/2 comme fonction de covariance (voir Table 2.1), et où les hyper-paramètres σ et θ sont estimés par la méthode du Maximum de Vraisemblance (MV). Remarquons que les simulations ne sont pas monotones sur tout le domaine et que l'intervalle de prédiction est assez large entre 0.4 et 0.9 (Figure 9b). Sur la Figure 9c, l'intervalle de prédiction et le mode sont illustrés en utilisant le modèle (3.7) conditionnellement monotone. Le noyau Matérn 5/2 a été utilisé comme fonction de covariance. En appliquant la méthode de validation croisée adaptée (voir Chapitre 5), on obtient $\sigma = 50.7$ et $\theta = 4.37$. L'intervalle de prédiction est bien réduit (voir Figure 9c). De plus, contrairement au modèle décrit dans [Golchi et al., 2015], il n'est pas nécessaire d'ajouter des informations sur la dérivée pour assurer la monotonie sur tout le domaine. Avec le modèle proposé dans ce chapitre, deux estimateurs peuvent être calculés la moyenne *a posteriori* (comme dans [Golchi et al., 2015]) et le maximum *a posteriori* (voir Définition 5).

3.7 Illustration numérique

Dans cette section, toutes les simulations numériques sont obtenues en utilisant le noyau gaussien et le noyau Matérn 3/2 comme fonctions de covariance. En dimension 1, on considère les contraintes inégalité suivantes : monotonie, convexité et bornes sur les valeurs de la fonction. En dimension 2, la monotonie croissante est considérée par rapport à chacune des deux variables, puis par rapport à une seule des deux variables.

3.7.1 Monotonie en dimension 1

On commence tout d'abord par deux exemples numériques en utilisant la monotonie comme contraintes inégalité (Figure 10).

Sur la Figure 10a, la fonction est supposée monotone croissante et évaluée en 11 points qui sont définis par le vecteur d'entrée $\mathbf{X} = (0, 0.05, 0.1, 0.3, 0.4, 0.45, 0.5, 0.8, 0.85, 0.9, 1)$ et où $\mathbf{y} = (0, 0.6, 1.1, 5.5, 7.2, 8, 9.1, 15, 16.3, 17, 20)$. On fixe $N = 50$ et on génère 40 simulations par le modèle (3.7) conditionnellement aux conditions d'interpolation

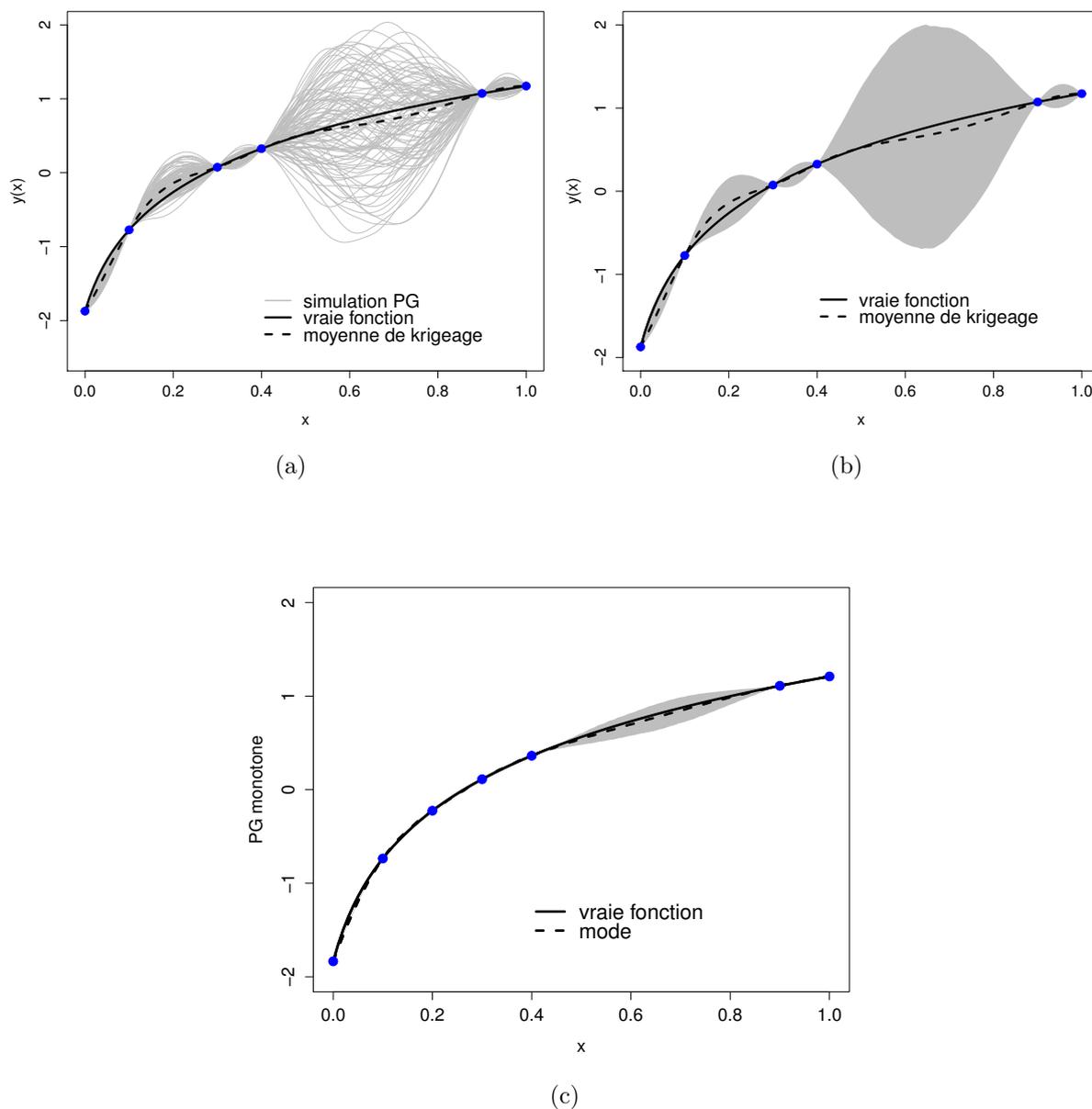


FIGURE 9 – La vraie fonction évaluée en sept points d’observation [Golchi et al., 2015] : (a) 100 simulations d’un PG sans tenir compte des contraintes inégalité et la moyenne *a posteriori*, (b) moyenne *a posteriori* et l’intervalle de prédiction à 95% en utilisant toujours le PG sans contraintes, et (c) le mode et l’intervalle de prédiction à 95% en utilisant le modèle (3.7) sous les deux contraintes d’interpolation et de monotonie.

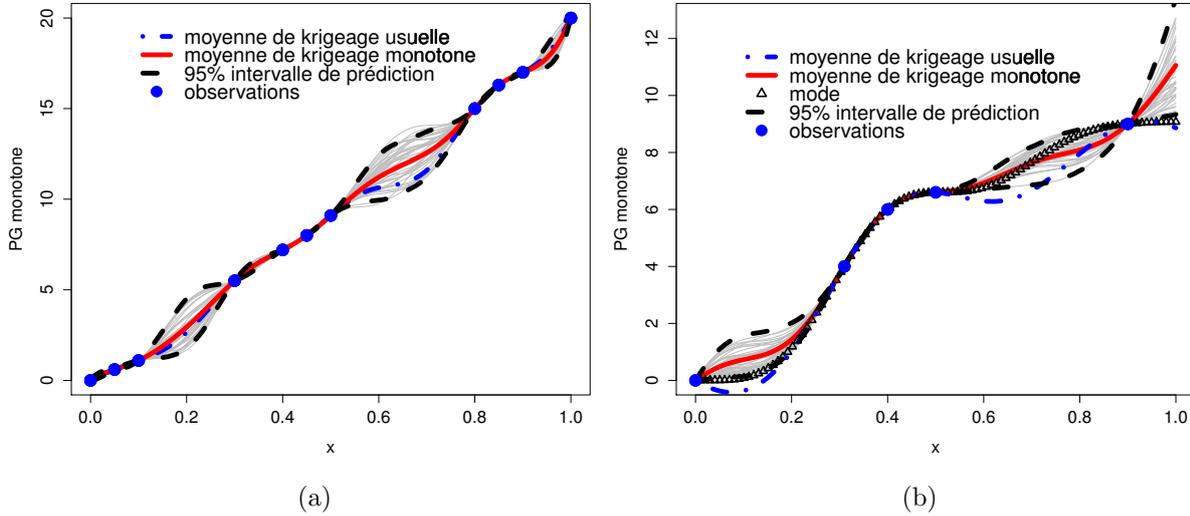


FIGURE 10 – Simulations d’un processus gaussien (trajectoires en gris) conditionnellement monotone croissant sur le domaine $[0, 1]$. La moyenne de krigeage usuelle (tiret-pointillé bleu) coïncide avec le mode (Maximum *A Posteriori*) et respecte les contraintes de monotonie sur la Figure 10a mais pas sur la Figure 10b.

(données d’observation) et aux contraintes de monotonie ($Y'(u_j) \geq 0, j = 0, \dots, N$). Le noyau gaussien est utilisé avec les hyper-paramètres (σ^2, θ) fixés à $(100, 0.2)$. Remarquons que toutes les simulations (courbes grises) sont monotones croissantes sur tout le domaine $[0, 1]$. La moyenne de krigeage sous contraintes m_{KI} (courbe rouge) comme moyenne de toutes les simulations est encore monotone. La moyenne de krigeage usuelle m_K et le mode M_{KI} (courbe bleue en tiret-pointillé) coïncident et sont encore monotones.

Sur la Figure 10b, le vecteur d’entrée est $\mathbf{X} = (0, 0.3, 0.4, 0.5, 0.9)$ et le vecteur de sortie associé est $\mathbf{y} = (0, 4, 6, 6.6, 10)$. Le noyau gaussien est encore utilisé avec les hyper-paramètres $(\sigma^2, \theta) = (100, 0.25)$. Dans ce cas, la moyenne de krigeage monotone (courbe rouge) et le mode (courbe en triangle) respectent les contraintes de monotonie, contrairement à la moyenne de krigeage usuelle (courbe bleue en tiret-pointillé) : cela correspond à la situation où le vecteur ξ_c est à l’extérieur de la zone d’acceptation.

3.7.2 Monotonie en dimension 1 avec des trajectoires de classe \mathcal{C}^0

Supposons maintenant que la fonction soit continue (mais pas dérivable), croissante et évaluée en 3 points donnés par le vecteur d’entrée $\mathbf{X} = (0.1, 0.4, 0.9)$ avec $\mathbf{y} = (-5, 5, 10)$

(Figure 11).

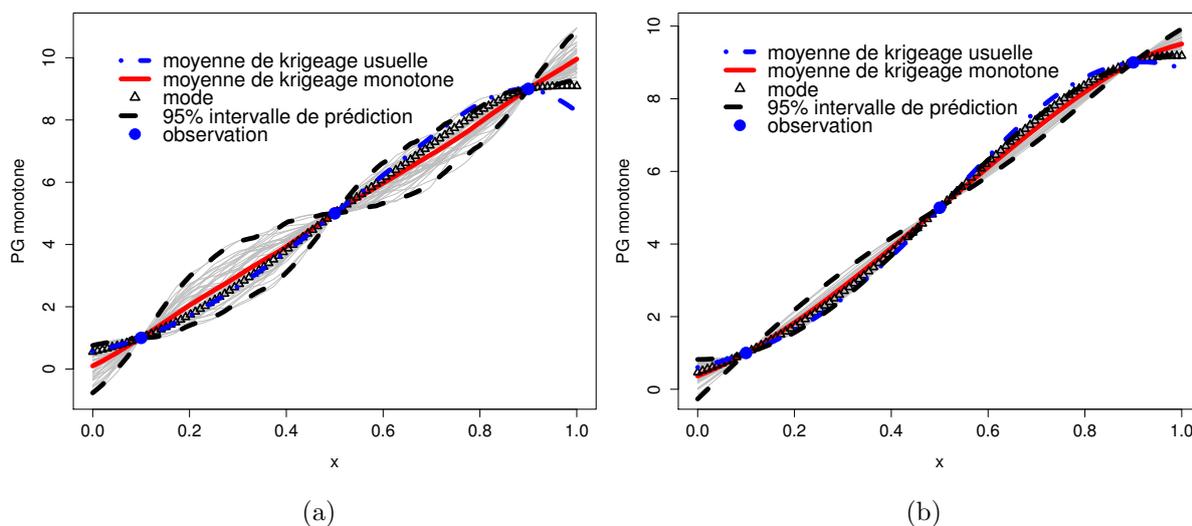


FIGURE 11 – Réalisations simulées (courbes grises) du modèle (3.5) en utilisant la Remarque 1. Remarquons que ces réalisations sont continues (non dérivables) et monotones sur tout le domaine. Le noyau Matérn 3/2 est utilisé sur la Figure 11a et le noyau gaussien sur la Figure 11b.

Les courbes grises sont les réalisations simulées du processus gaussien fini-dimensionnel défini par (3.5) conditionnellement aux conditions d'interpolation et aux contraintes de monotonie en utilisant la Remarque 1. Dans ce cas, on fixe $N = 40$ et on génère 40 simulations. Remarquons que ces trajectoires sont continues (mais pas dérivables). Elles sont monotones croissantes sur tout le domaine, contrairement à la moyenne de krigeage usuelle. Le mode (Maximum *A Posteriori*) et la moyenne de krigeage monotone (moyenne des simulations) vérifient les contraintes de monotonie sur tout le domaine $[0, 1]$. Dans ces deux figures, on fixe les hyper-paramètres de la fonction de covariance (σ^2, θ) à $(4, 0.4)$. Dans ce cas, la seule différence entre ces deux figures est que le noyau Matérn 3/2 est utilisé sur la Figure 11a et le noyau gaussien sur la Figure 11b. Avec les mêmes paramètres de covariance, on trouve que les simulations varient plus dans le cas du noyau Matérn que le cas du noyau gaussien avec un intervalle de prédiction plus grand pour le premier. Dans le Chapitre 5, on montre que les deux méthodes classiques pour estimer les hyper-paramètres de covariance (EMV et VC, cf. Chapitre 2 Section 2.6) ne sont pas adaptées et on propose une technique de validation croisée adaptée.

3.7.3 Contraintes de borne en dimension 1

Maintenant, on considère deux situations : $f \geq 0$ et $a = -20 \leq f \leq b = 20$ (Figure 12a et Figure 12b respectivement). Sur ces deux figures, on fixe $N = 50$ et on génère 100 simulations d'un processus gaussien sous contrainte. Le noyau gaussien est utilisé sur les deux figures avec les paramètres $(\sigma^2, \theta) = (100, 0.15)$ (Figure 12a) et $(\sigma^2, \theta) = (400, 0.2)$ (Figure 12b). Sur la Figure 12a, ξ_c est à l'intérieur de la zone d'acceptation et la moyenne de krigeage usuelle coïncide avec le mode et respecte les contraintes inégalité, contrairement à la Figure 12b, où ξ_c est à l'extérieur de la zone d'acceptation. Dans ces deux figures, les trajectoires simulées (courbes en gris) respectent les contraintes inégalité sur tout le domaine. Remarquons que dans les deux Figures 12a et 12b, la moyenne des simulations (courbe rouge) admet une trajectoire moins régulière que le mode qui est la courbe la plus probable. Cette observation numérique est expliquée dans les Chapitres 6 et 7. Elle conduit à faire le lien entre les splines et le krigeage dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité.

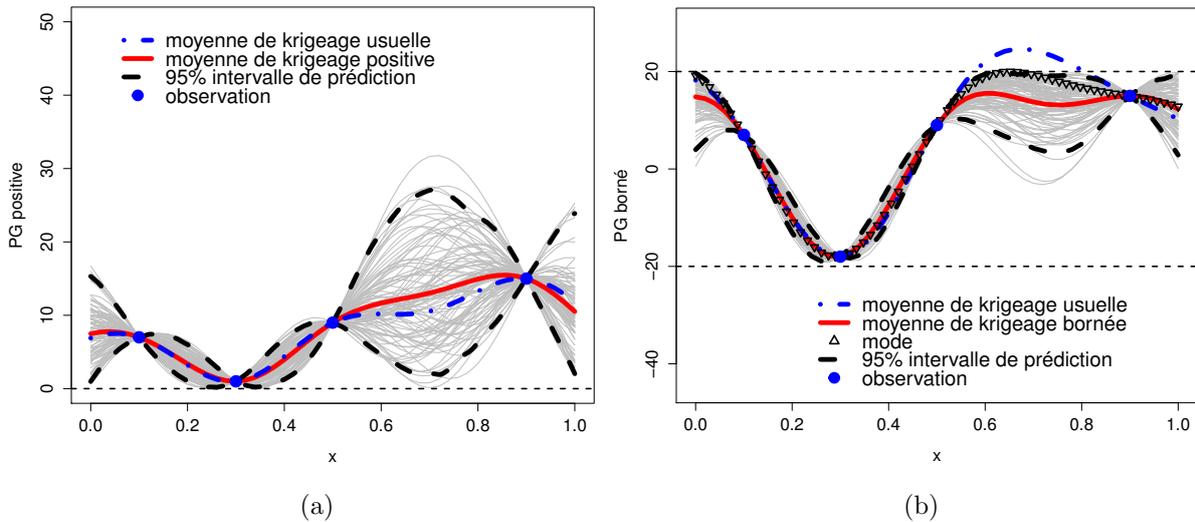


FIGURE 12 – Réalisations simulées (courbes en gris) d'un processus gaussien conditionnellement positif (Figure 12a) et borné (Figure 12b). La moyenne de krigeage usuelle et le mode coïncident sur la Figure 12a mais pas sur la Figure 12b.

3.7.4 Convexité en dimension 1

Dans la suite, on suppose que la vraie fonction est convexe sur l'intervalle $[0, 1]$ et évaluée en trois points (Figure 13). Le vecteur d'entrée est $\mathbf{X} =$

$(0, 0.05, 0.2, 0.5, 0.85, 0.92)$ et celui de sortie est $\mathbf{y} = (20, 15, 3, -5, 7, 15)$. Le noyau gaussien est utilisé comme fonction de covariance avec les paramètres $(\sigma^2, \theta) = (100, 0.3)$. On fixe $N = 50$ et on génère 25 simulations du modèle (3.8) conditionnement aux données d'observation et aux contraintes de convexité ($\xi_j \geq 0, j = 0, \dots, N$). Ces trajectoires (courbes en gris), le mode (Maximum *A Posteriori*) et la moyenne de krigeage (moyenne de trajectoires grises) sont convexes sur tout le domaine, contrairement à la moyenne de krigeage usuelle (courbe bleue en tiret-pointillé).

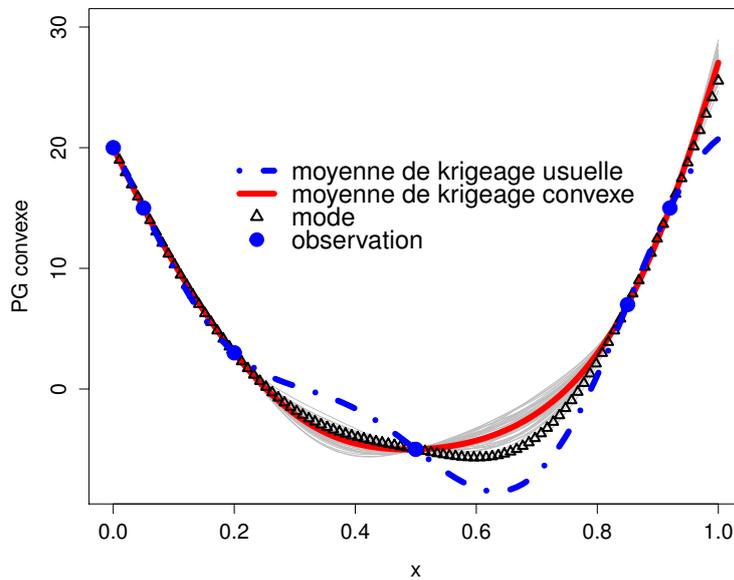


FIGURE 13 – Simulations d'un processus gaussien conditionnellement convexe. La moyenne de krigeage usuelle (courbe bleue en tiret-pointillé) ne respecte pas les contraintes de convexité, contrairement au mode et la moyenne de krigeage convexe.

3.7.5 Monotonie en dimension 2

En dimension 2, le but est d'interpoler une fonction 2D définie sur $[0, 1]^2$ et monotone par rapport aux deux variables d'entrée. Dans ce cas, on se donne une grille uniforme du domaine carré d'entrée, le nombre de nœuds et de fonctions de base étant égal à $(N + 1)^2$. Dans les Figures 14, 15 et 16, on choisit $N = 7$, soit au total 64 nœuds et fonctions de base. Supposons que la fonction soit connue sur quatre points donnés par les lignes de la matrice de taille 4×2 suivante : $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.9 & 0.5 & 0.8 \\ 0.4 & 0.3 & 0.6 & 0.9 \end{bmatrix}^T$. Le vecteur de sortie correspondant est choisi égal à $\mathbf{y} = (5, 12, 13, 25)$. Remarquons que

3.7. ILLUSTRATION NUMÉRIQUE

les ces valeurs sont compatibles avec la monotonie en dimension deux. La Figure 15a montre 5 surfaces simulées en utilisant le processus gaussien défini par l'équation (3.9) et conditionnellement aux données d'observations et aux contraintes de monotonie. Dans ce cas, le noyau gaussien bi-varié est utilisé avec les hyper-paramètres fixés à $\sigma^2 = 100$ et $(\theta_1, \theta_2) = (1, 1)$. Les deux surfaces en rouge représentent l'intervalle de prédiction à 95%. Ces intervalles sont obtenus par simulation. Pour visualiser la monotonie des surfaces simulées, on trace sur la Figure 15b les lignes de niveau d'une simulation. Les points en bleu représentent les données d'observation (ou les points expérimentaux). Dans ce cas, si l'on fixe l'une des deux variables et qu'on trace la ligne verticale ou horizontale associée, elle intersecte une ligne de niveau au plus une fois.

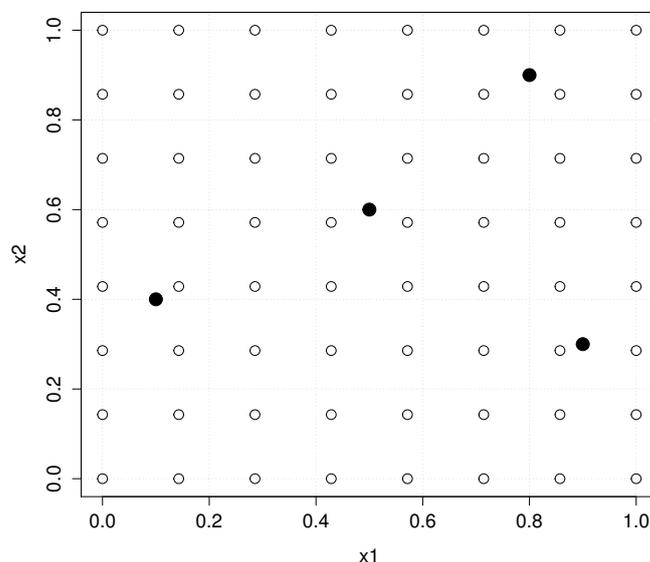


FIGURE 14 – Les points expérimentaux pour la monotonie 2D (points noirs) et les nœuds $(u_i, u_j)_{0 \leq i, j \leq 7}$ qui sont utilisés pour construire les fonctions de base.

Sur la Figure 16, on montre quelques simulations relatives à la Figure 15a. Toutes les surfaces simulées sont croissantes par rapport aux deux variables d'entrée.

La Figure 17 montre une surface simulée par un processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable seulement.

3.7.6 Convergence numérique

Rappelons que le modèle décrit dans ce chapitre est un modèle d'approximation du processus gaussien initial Y . Pour étudier la performance de ce modèle, on évalue la

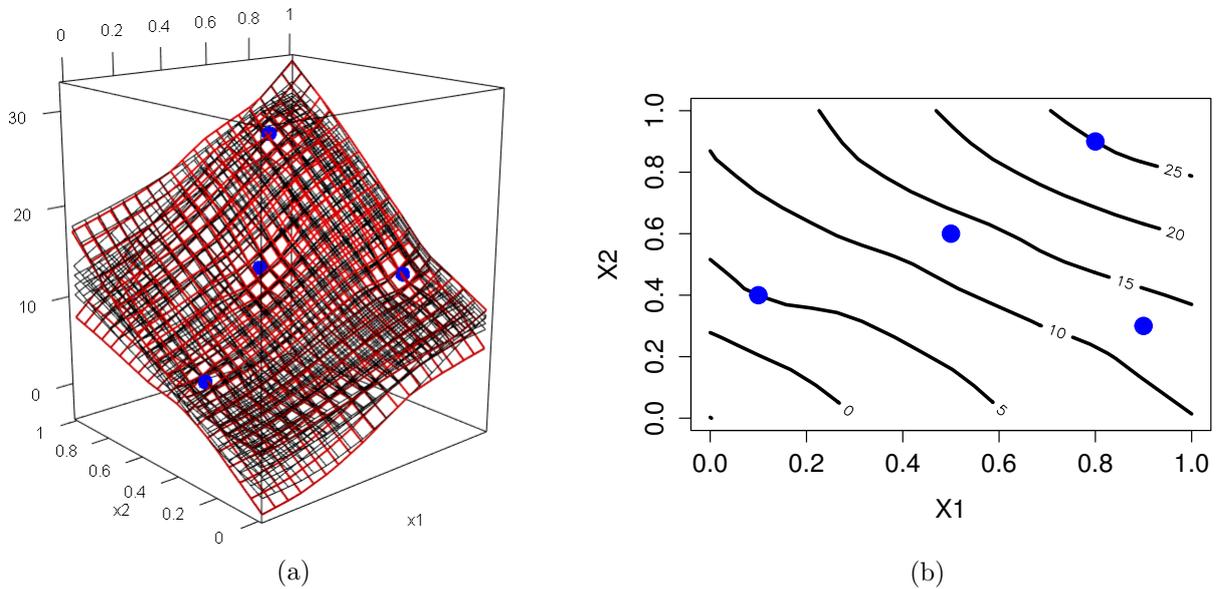


FIGURE 15 – Réalisations d’un processus gaussien conditionnellement monotone par rapport aux deux variables (Figure 15a). Lignes de niveau associées à une simulation (Figure 15b).

vitesse de convergence en fonction de N qui croît en fonction de la dimension de l’espace d’approximation.

Sur la Figure 18, on fixe $N = 500$ et on trace la fonction mode (Maximum *A Posteriori*) M_{KI} du processus gaussien approché Y^N conditionnellement borné entre 0 et 1. Remarquons que la courbe rouge en tiret qui correspond à la fonction mode pour N petit ($N = 10$ et $N = 20$) coïncide rapidement avec la courbe bleue qui correspond à la fonction mode pour $N = 500$.

Sur la Figure 19, le cas de la monotonie est étudié. On fixe $N = 500$ et on représente la fonction mode $M_{KI}(x)$.

3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, on a proposé un nouveau modèle capable d’intégrer les conditions d’interpolation et les contraintes linéaires de type inégalité dans le cadre de la régression par processus gaussien. Avec ce modèle, les contraintes inégalité sont respectées sur tout le domaine et non pas en un nombre fini de points seulement. Notre méthodologie est basée sur une approximation du processus gaussien initial par un processus gaussien fini-dimensionnel uniformément convergent vers le premier. Il est construit par combinaison

3.8. CONCLUSION

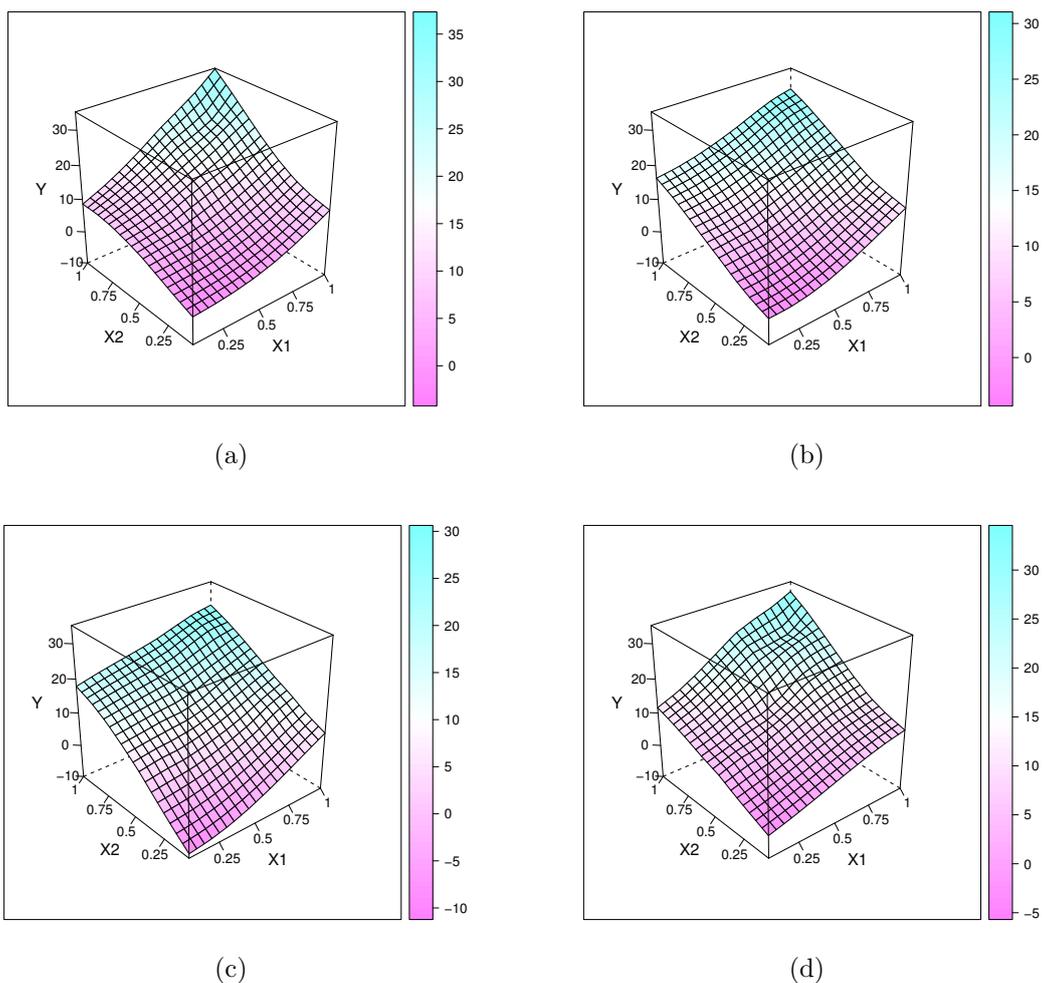


FIGURE 16 – Surfaces simulées de l'exemple numérique utilisé pour la Figure 15a. Elles sont monotones par rapport aux deux variables.

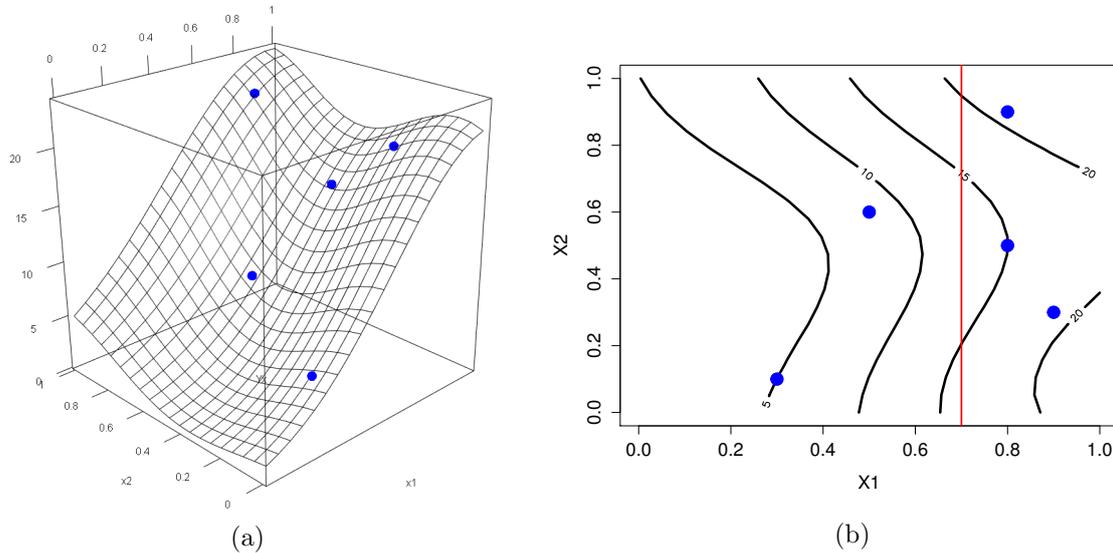


FIGURE 17 – Simulations d'un processus gaussien conditionnellement monotone (croissant) par rapport à la première variable et lignes de niveau associées.

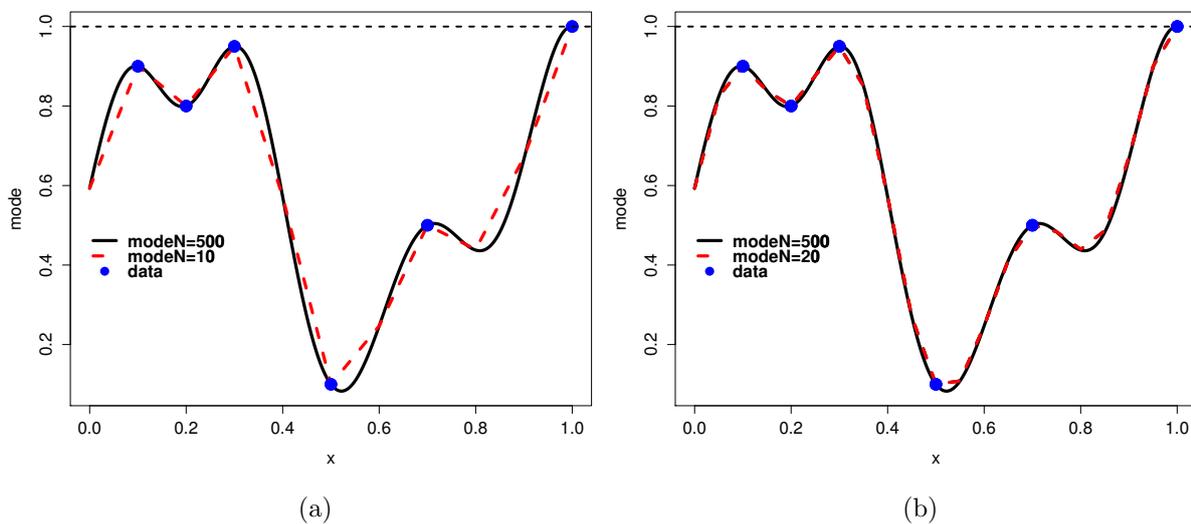


FIGURE 18 – La courbe noire dans les deux figures représente la fonction mode du processus gaussien conditionnellement borné entre 0 et 1 pour $N = 500$. La courbe en tiret rouge est la fonction mode pour $N = 10$ (Figure 18a) et $N = 20$ (Figure 18b). Remarquons que la courbe en tiret rouge coïncide quasiment avec la courbe noire pour $N = 20$.

3.8. CONCLUSION

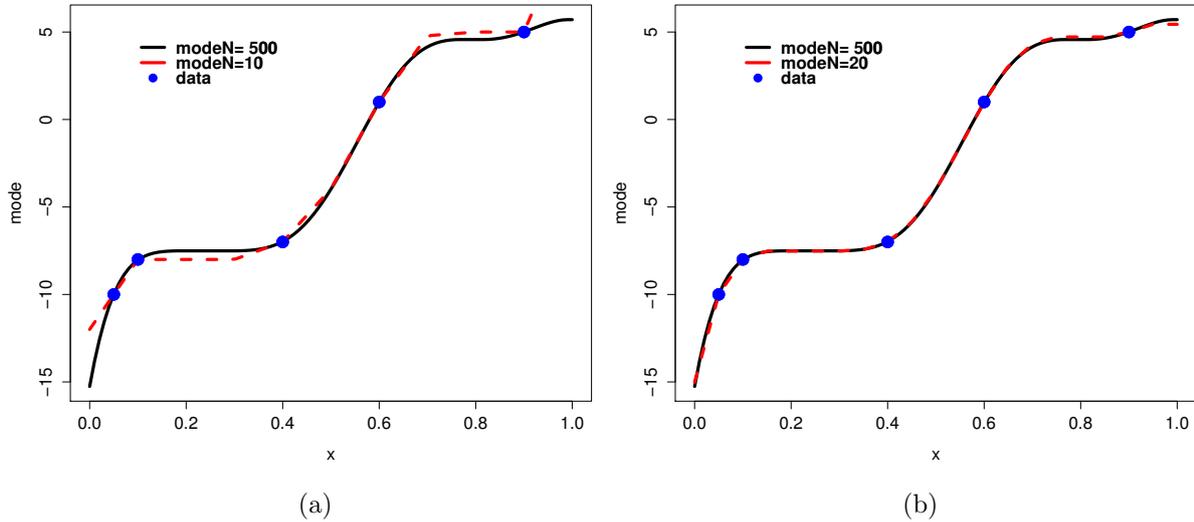


FIGURE 19 – La courbe noire dans les deux figures représente la fonction mode du processus gaussien conditionnellement monotone pour $N = 500$. La courbe en tiret rouge est la fonction mode pour $N = 10$ (Figure 19a) et $N = 20$ (Figure 19b). Remarquons que la courbe en tiret rouge coïncide quasiment avec la courbe noire pour $N = 20$.

linéaire finie de fonctions de base déterministes avec des coefficients aléatoires. La variabilité de ce processus est assurée par la variabilité des coefficients. Les contraintes inégalité sont satisfaites par construction. On a montré que ces fonctions de base peuvent être choisies de sorte que les contraintes inégalité sur le processus gaussien Y^N soient *équivalentes* à un nombre fini de contraintes linéaires sur les coefficients. Par suite, l'infinité de contraintes inégalité sur le processus se réduit à un nombre fini de contraintes linéaires sur les coefficients. De plus, le problème de simulation du processus gaussien Y^N sous les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité revient à simuler un vecteur gaussien tronqué à un sous-espace convexe. Ce type de problème est connu dans la littérature et on propose au Chapitre 4 un algorithme de rejet pour simuler une loi multi-normale tronquée à un sous-espace convexe.

Dans le Chapitre 5, on explore une méthode de Validation Croisée adaptée aux contraintes de type inégalité pour estimer les hyper-paramètres du noyau initial.

Chapitre 4

Nouvelle technique de rejet pour simuler une loi multi-normale tronquée à un espace convexe

Sommaire

4.1	Introduction	83
4.2	Méthode de rejet générale	84
4.3	Méthodes de rejet existantes	86
4.4	Algorithme de rejet utilisant le mode (RSM)	87
4.5	Comparaison avec d'autres méthodes de rejet	89
4.5.1	Performance en dimension 1	89
4.5.2	Cas multi-dimensionnel	91
4.6	Conclusion	94

4.1 Introduction

La simulation d'une loi multi-normale tronquée intervient dans plusieurs domaines comme l'analyse bayésienne (voir e.g. [Gelfand et al., 1992] et [Geweke, 1986]), la modélisation de processus gaussiens conditionnels sous contraintes linéaires de type inégalité (voir e.g. [Da Veiga and Marrel, 2012], [Emery et al., 2013], [Freulon and Fouquet, 1993] et [Maatouk and Bay,]) et dans les modèles de régression sous contraintes (voir e.g. [Geweke, 1991] et [Jun-wu YU, 2011]). Deux classes de méthodes ont été particulièrement développées. La première est basée sur la simulation par chaîne de Markov (McMC) [Casella and George, 1992], [Laud et al., 2010] et [Robert and Casella, 2004], avec la technique d'échantillonnage de Gibbs [Breslaw, 1994],

[Geweke, 1991], [Griffiths, 2002], [Kotecha and Djuric, 1999], [Li and Ghosh,], [Robert, 1995] et [Rodriguez-Yam et al., 2004]. Cette méthode fournit des simulations d'une loi approchée mais asymptotiquement convergente vers la vraie distribution. La deuxième est une méthode exacte basée sur la technique de rejet (voir l'article [Von Neumann, 1951]) et ses extensions [Devroye, 1986], [Hörmann et al., 2004] et [Laud et al., 2010]. Dans ce chapitre, on s'intéresse à cette deuxième classe de méthodes.

Récemment, la méthode de rejet a aussi été combinée avec la technique d'échantillonnage de Gibbs [Geweke, 1991], [Gilks and Wild, 1992], [Martino and Miguez, 2009a], [Martino and Miguez, 2009b] et [Robert, 1995]. En dimension 1 deux méthodes de rejet avec un taux d'acceptation élevé ont été développées dans [Robert, 1995] et [Geweke, 1991]. [Robert, 1995] a proposé un algorithme de simulation qui permet de simuler une loi normale tronquée à un intervalle borné ou non. [Geweke, 1991] a proposé aussi un algorithme de rejet basé sur la loi exponentielle pour simuler une loi normale tronquée. Le cas multi-dimensionnel est réduit en utilisant l'algorithme de Gibbs. En dimension 1, [Chopin, 2011] a proposé un algorithme efficace pour simuler une loi normale tronquée. Sa méthode est basée sur une décomposition de l'intervalle de troncature en sous-intervalles de même probabilité. Une méthode de rejet pour simuler un vecteur gaussien tronqué à l'extérieur d'un ellipsoïde a été développée par Eliss et Maitra (voir l'article [Ellis and Maitra, 2007]). Pour la grande dimension, Philippe et Robert (voir l'article [Philippe and Robert, 2003]) ont proposé une méthode pour simuler un vecteur gaussien tronqué dans le quadrant positif. Finalement, [Botts, 2013] a amélioré l'algorithme proposé par [Philippe and Robert, 2003] pour simuler une loi multi-normale en utilisant la méthode de rejet. L'idée de cette méthode est basée sur une correction de la densité proposée dans [Gupta et al., 2004].

Dans ce chapitre, on propose une technique de rejet pour simuler une loi multi-normale tronquée à n'importe quel sous-espace convexe de \mathbb{R}^d . Cette méthode tire profit du calcul du mode de la fonction densité tronquée (cf. Chapitre 3). La constante de rejet optimale est déterminée de manière analytique.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante : tout d'abord, on rappelle dans la Section 4.2 la méthode de rejet générale. Dans la Section 4.3, on décrit quelques techniques classiques pour simuler une loi normale (ou multi-normale) tronquée. Ensuite, dans la Section 4.4 on présente la technique basée sur le mode et appelée *rejection sampling from the mode* (RSM) ainsi que l'algorithme qui en dérive. Finalement, la méthode de rejet proposée (RSM) est comparée avec les algorithmes de rejet existants dans la Section 4.5.

4.2 Méthode de rejet générale

Soit f la densité à simuler et définie sur \mathbb{R}^d . Von Neumann (voir l'article [Von Neumann, 1951]) a proposé la méthode de rejet suivante. Supposons que g soit une densité proche de f telle que, pour une constante $c \geq 1$ appelée constante de rejet,

on ait :

$$f(x) \leq cg(x), \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

La méthode de rejet est un algorithme utilisé pour générer des simulations de la densité f à partir de simulations de la densité proposée g et de la distribution uniforme.

Théorème 5 (Algorithme de rejet, [Von Neumann, 1951]). *Supposons que f et g soient deux fonctions de densité telles que $f(x) \leq cg(x)$ pour tout x dans le support de f . Alors la variable aléatoire X qui dérive de l'algorithme suivant a une distribution de densité f .*

1. Générer X avec la fonction densité g .
2. Générer U uniformément sur $[0, 1]$. Si $cg(X)U \leq f(X)$, on accepte X ; sinon, on revient à l'étape 1.

De plus, on peut démontrer que le taux d'acceptation est égal à $1/c$. En pratique, il est essentiel d'avoir une constante c la plus proche possible de 1.

Nous attirons l'attention sur le fait que l'algorithme de rejet peut se généraliser facilement au cas d'une fonction pseudo-densité (i.e. une fonction à valeurs positives et d'intégrale finie), pour éviter le calcul (quelque fois impossible) de la constante de normalisation.

Corollaire 3. *Soit C un sous-espace de \mathbb{R}^d et soient \tilde{f} et \tilde{g} deux fonctions pseudo-densités sur C telles que $\tilde{f}(x) \leq k\tilde{g}(x)$. Alors l'algorithme qui est défini dans le Théorème 5 reste valable si la condition d'inégalité $cg(X)U \leq f(X)$ est remplacée par*

$$k\tilde{g}(X)U \leq \tilde{f}(X). \tag{4.1}$$

Dans ce cas, la constante de rejet est $c = k \frac{\int_C \tilde{g}(t) dt}{\int_C \tilde{f}(t) dt}$.

Preuve. On a $\tilde{f}(x) \leq k\tilde{g}(x)$, et donc

$$f(x) = \frac{\tilde{f}(x)}{\int_C \tilde{f}(t) dt} \leq c \frac{\tilde{g}(x)}{\int_C \tilde{g}(t) dt} = cg(x),$$

où $c = k \frac{\int_C \tilde{g}(t) dt}{\int_C \tilde{f}(t) dt}$. La condition d'inégalité $cg(X)U \leq f(X)$ est équivalente à

$$k\tilde{g}(X)U \leq \tilde{f}(X),$$

ce qui termine la preuve. □

4.3 Méthodes de rejet existantes

[Robert, 1995] a développé des algorithmes pour simuler une loi normale tronquée utilisables pour simuler une loi multi-normale tronquée. On rappelle brièvement sa méthode. Sans perte de généralité, on suppose que l'on cherche à simuler une loi normale centrée réduite tronquée à l'intervalle $[\mu^-, \mu^+]$. Son algorithme de rejet est basé sur la distribution uniforme $\mathcal{U}_{[\mu^-, \mu^+]}$:

1. Générer la variable X uniformément sur $[\mu^-, \mu^+]$.
2. On calcule $g(X) = \begin{cases} \exp(-X^2/2) & \text{si } 0 \in [\mu^-, \mu^+], \\ \exp((\mu^+)^2 - X^2/2) & \text{si } \mu^+ < 0, \\ \exp((\mu^-)^2 - X^2/2) & \text{si } 0 < \mu^-. \end{cases}$
3. Générer U uniformément sur $[0, 1]$. Si $U \leq g(X)$, on accepte X ; sinon, on revient à l'étape 1.

Dans le cas où $0 < \mu^-$, la fonction de densité proposée dans l'algorithme de rejet du Théorème 5 est $g(x) = \exp(-x^2/2)$ et la constante optimale $c = \exp(-(\mu^-)^2/2)$. Dans le cas multi-dimensionnel où la zone d'acceptation est $\prod_{i=1}^d [\mu_i^-, \mu_i^+]$, la méthode est basée sur le même algorithme en utilisant la technique de Gibbs pour réduire la simulation à une séquence de simulations en dimension 1.

Un algorithme de rejet efficace dans le cas multi-dimensionnel pour simuler une loi normale multivariée tronquée à l'extérieur d'un ellipsoïde a été développé dans [Ellis and Maitra, 2007]. La moyenne du vecteur gaussien est supposée à l'extérieur de la zone d'acceptation. L'idée de base est d'utiliser le résultat suivant (voir Théorème de Cochran) : soit \mathbf{X} un vecteur gaussien aléatoire d -dimensionnel centré réduit et Y indépendant de \mathbf{X} dont la distribution admet la fonction densité

$$f_Y(y) = c \exp\left(-\frac{y}{2}\right) y^{\frac{d}{2}-1} \mathbf{1}_{y > R^2},$$

qui correspond à la loi du χ^2 tronquée à l'intervalle $[R^2, +\infty[$ (c est une constante de normalisation). Alors, $\mathbf{Z} = \sqrt{Y} \frac{\mathbf{X}}{\|\mathbf{X}\|}$ admet la fonction densité

$$f_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{z}\|^2}{2}\right) \mathbf{1}_{\|\mathbf{z}\| > R}. \quad (4.2)$$

Ce résultat montre que \mathbf{Z} est de loi normale tronquée à l'extérieur d'une sphère de rayon R . La simulation de la loi de \mathbf{Z} se ramène ainsi à la simulation d'une loi tronquée en dimension 1 et du vecteur \mathbf{X} indépendant de loi $\mathcal{N}(0, I_d)$.

4.4 Algorithme de rejet utilisant le mode (RSM)

On suppose que X suit la loi normale multivariée de densité la fonction suivante :

$$f(x \mid \mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^\top \Sigma^{-1}(x - \mu)\right), \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (4.3)$$

où $\mu = \mathbb{E}(X)$ est la moyenne et Σ est la matrice de covariance supposée inversible.

On considère le sous-espace convexe C de \mathbb{R}^d qui correspond à l'espace d'acceptation (zone admissible). On peut supposer que $\mu = 0$. Le but est de simuler la variable aléatoire normale multivariée X tronquée à l'espace convexe C . Dans un premier temps, on calcule le mode μ^* qui maximise la fonction densité f restreinte à l'espace convexe C . Ce vecteur est la solution du problème d'optimisation convexe suivant :

$$\mu^* = \arg \min_{x \in C} \frac{1}{2} x^\top \Sigma^{-1} x. \quad (4.4)$$

Dans un deuxième temps, on définit g comme la fonction densité obtenue en translatant f de $\mu = 0$ à $\mu = \mu^*$ avec la même matrice de covariance Σ :

$$g(x \mid \mu^*, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu^*)^\top \Sigma^{-1}(x - \mu^*)\right). \quad (4.5)$$

On utilise alors l'algorithme de rejet pour simuler la loi multi-normale X tronquée à l'espace convexe C , ce qui passe par le calcul de la constante optimale.

Théorème 6. Soient \tilde{f} et \tilde{g} deux fonctions de pseudo-densité définies par :

$$\tilde{f}(x) = f(x \mid 0, \Sigma) \mathbb{1}_{x \in C} \quad \text{et} \quad \tilde{g}(x) = g(x \mid \mu^*, \Sigma) \mathbb{1}_{x \in C},$$

où f et g sont définies dans les deux équations (4.3) et (4.5). Alors, il existe une constante k telle que $\tilde{f}(x) \leq k\tilde{g}(x)$, pour tout x dans C et la valeur optimale de k est

$$k^* = \exp\left(-\frac{1}{2}(\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^*\right).$$

Preuve. On donne la preuve dans le cas uni-dimensionnel avec $C = [\mu^*, +\infty[$, où $\mu^* \geq 0$ et $\Sigma = \sigma^2$. Dans ce cas, la condition $\tilde{f}(x) \leq k\tilde{g}(x)$ peut s'écrire :

$$\forall x \geq \mu^*, \quad e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \leq k e^{-\frac{(x-\mu^*)^2}{2\sigma^2}},$$

ce qui implique

$$k^* = e^{\frac{(\mu^*)^2}{2\sigma^2}} \max_{x \geq \mu^*} e^{-\frac{x\mu^*}{\sigma^2}} = e^{\frac{(\mu^*)^2}{2\sigma^2}} e^{-\min_{x \geq \mu^*} \frac{x\mu^*}{\sigma^2}} = e^{-\frac{(\mu^*)^2}{2\sigma^2}}.$$

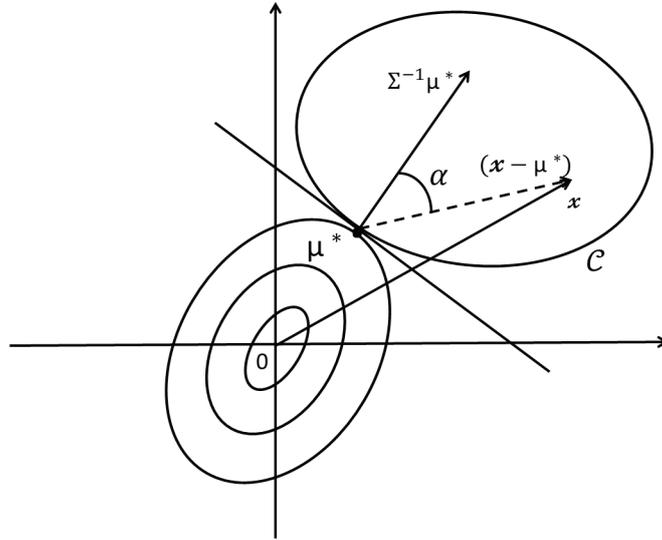


FIGURE 20 – Produit scalaire entre le vecteur gradient $\Sigma^{-1}\mu^*$ de la fonction $\frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1}x$ au point μ^* et le vecteur $(x - \mu^*)$ pour $x \in C$. Les ellipsoïdes représentent les lignes de niveau associées à la fonction $x \mapsto \frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1}x$.

Dans le cas multi-dimensionnel, on a $k^* = \max_{x \in C} e^{\frac{1}{2}(\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^* - x^\top \Sigma^{-1} \mu^*}$. Comme $\mu^* \in C$, il suffit de montrer que

$$\forall x \in C, \quad x^\top \Sigma^{-1} \mu^* \geq (\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^*.$$

L'angle entre le vecteur gradient $\Sigma^{-1}\mu^*$ de la fonction $\frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1}x$ au point μ^* et le vecteur $(x - \mu^*)$ est aigu pour tout x dans C car C est convexe (voir Figure 20). Par suite, $(x - \mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^* \geq 0$ pour tout x dans C . □

Finalement, on peut résumer l'algorithme dans le Théorème 5 suivant :

Théorème 7 (Algorithme RSM). Soient \tilde{f} et \tilde{g} deux pseudo-densités définies par :

$$\tilde{f}(x) = f(x \mid 0, \Sigma) \mathbf{1}_{x \in C} \quad \text{et} \quad \tilde{g}(x) = g(x \mid \mu^*, \Sigma) \mathbf{1}_{x \in C},$$

où f et g sont définies par les équations (4.3), (4.4) et (4.5). Alors le vecteur aléatoire X qui dérive de l'algorithme suivant admet la densité associée à la fonction \tilde{f} .

1. Générer X avec la fonction pseudo-densité \tilde{g} (i.e. simuler X avec la densité g tant que $X \notin C$).
2. Générer U uniformément sur $[0, 1]$. Si $U \leq \exp((\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^* - X^\top \Sigma^{-1} \mu^*)$, on accepte X ; sinon on revient à l'étape 1.

Preuve. On applique le Corollaire 3 avec la constante optimale k^* qui est calculée dans le Théorème 6. La condition d'inégalité (4.1) est égale à

$$U \leq e^{\frac{1}{2}(\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^*} e^{-\frac{1}{2} X^\top \Sigma^{-1} X} e^{\frac{1}{2}(X - \mu^*)^\top \Sigma^{-1} (X - \mu^*)},$$

qui est équivalent à

$$U \leq \exp\left((\mu^*)^\top \Sigma^{-1} \mu^* - X^\top \Sigma^{-1} \mu^*\right). \quad (4.6)$$

□

Remarque 3. Si $\mu \in C$, l'algorithme RSM revient à simuler directement f puisque $\mu^* = \mu$ et $g = f$. Par suite, on peut voir notre algorithme RSM comme une généralisation de l'algorithme de rejet usuel pour une loi tronquée.

Remarque 4. La méthode de rejet proposée dans ce chapitre exige seulement le calcul du maximum de vraisemblance du vecteur gaussien tronqué au sous-espace convexe C (zone d'acceptation). En réalité, c'est le mode du vecteur gaussien tronqué. Son calcul numérique est un problème standard dans la minimisation de formes quadratiques sous contraintes convexes, voir par exemple [Boyd and Vandenberghe, 2004] et [Goldfarb and Idnani, 1983]. Dans nos simulations, l'algorithme proposé dans [Goldfarb and Idnani, 1983] est utilisé pour résoudre le problème quadratique.

4.5 Comparaison avec d'autres méthodes de rejet

4.5.1 Performance en dimension 1

Pour étudier la performance de la méthode proposée dans ce chapitre, on considère tout d'abord le cas uni-dimensionnel $d = 1$. L'efficacité de l'algorithme proposé intervient dans le cas où la probabilité d'être dans la zone d'acceptation est faible. Sans perte de généralité du problème, on simule une loi normale centrée réduite. Dans la Table 4.1, les résultats sont obtenus en simulant une loi normale tronquée sur l'intervalle $[\mu^-, +\infty[$. La position de μ^- est ajustée pour avoir une probabilité plus ou moins faible (voir Figure 21 où $\mu^- = 0.5$ (Figure 21a) et $\mu^- = 1.5$ (Figure 21b)).

Par la dernière colonne du Table 4.1, on remarque que l'algorithme de rejet en utilisant le mode est plus efficace que celui du rejet usuel. Par exemple, l'algorithme RSM est à peu près 14000 fois plus rapide dans le cas où la zone d'acceptation est égale à $[4.5, +\infty[$. Un autre critère de performance de l'algorithme proposé est que le taux d'acceptation reste stable pour les différentes valeurs de μ^- (valeurs proches de 10%). Par contre, ce taux d'acceptation décroît rapidement vers zéro lorsque μ^- devient grand pour l'algorithme de rejet usuel.

4.5. COMPARAISON AVEC D'AUTRES MÉTHODES DE REJET

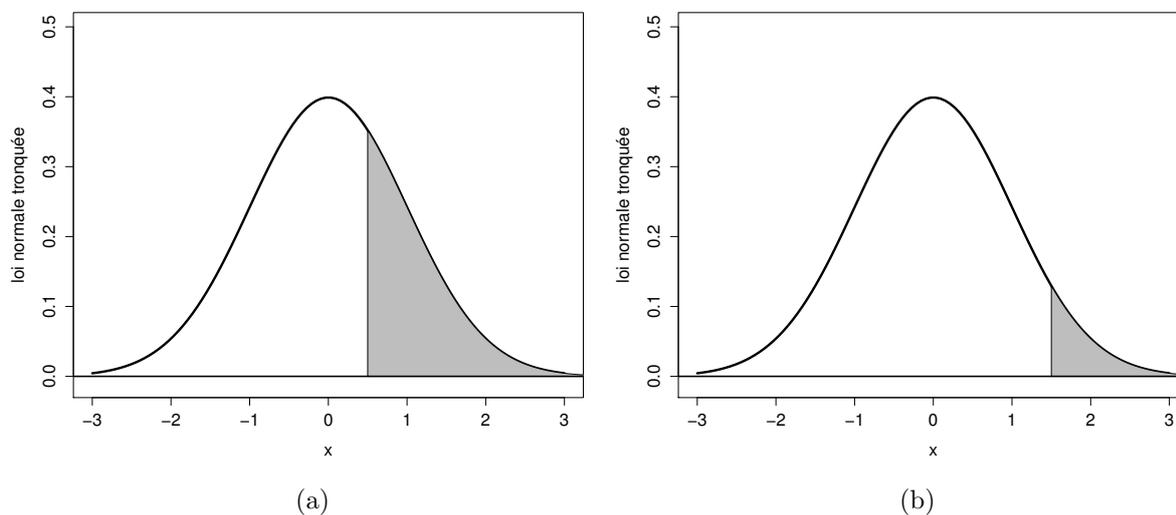


FIGURE 21 – Loi normale centrée réduite tronquée sur $[\mu^-, +\infty]$ où $\mu^- = 0.5$ (Figure 21a) et $\mu^- = 1.5$ (Figure 21b).

TABLE 4.1 – Comparaison entre l’algorithme de rejet usuel et l’algorithme RSM dans le cas où la probabilité de l’intervalle tronqué est faible. La zone admissible est $C = [\mu^-, +\infty[$.

μ^-	Taux d’acceptation avec le rejet usuel (%)	Taux d’acceptation avec RSM (%)	Gain
0.5	30.8	34.9	1.1
1	15.8	26.2	1.6
1.5	6.7	20.5	3.0
2	2.2	16.8	7.4
2.5	0.6	14.2	23.1
3	0.1	12.2	92.0
3.5	0.0	10.6	455.6
4	0.0	9.3	2936.7
4.5	0.0	8.4	14166.0

TABLE 4.2 – Comparaison du taux d’acceptation entre l’algorithme RSM et l’algorithme présenté dans [Robert, 1995] en fonction de la distance entre μ^- et μ^+ . Dans ce cas, la zone d’acceptation est $C = [\mu^-, \mu^+]$, où μ^- est fixé à 1.

$\mu^+ - \mu^-$	Méthode de Robert (%)	Rejet par le mode RSM (%)	Gain
0.5	77.8	18.0	0.2
1	56.4	21.2	0.3
2	35.0	27.4	0.7
5	11.6	28.2	2.4
10	7.0	28.4	4.0

[Robert, 1995] a proposé une méthode de rejet pour simuler une loi normale tronquée en dimension 1. Pour comparer les taux d’acceptation de son algorithme et ceux de l’algorithme de RSM, on considère une variable aléatoire normale standard (centrée et réduite) tronquée entre μ^- et μ^+ avec $\mu^- = 1$. Dans la méthode de Robert, le taux d’acceptation est élevé lorsque l’intervalle d’acceptation est petit (voir Table 2.2 dans l’article [Robert, 1995]). Dans l’algorithme RSM, on simule à partir d’une distribution translatée avec la même matrice de covariance (première étape dans l’algorithme RSM), par suite le taux d’acceptation est plus important lorsque la zone d’acceptation (ou l’intervalle admissible) est large. Cela est confirmé par la Table 4.2 où, par exemple l’algorithme RSM est 4 fois plus rapide que l’algorithme de Robert lorsque $\mu^+ - \mu^- = 10$.

4.5.2 Cas multi-dimensionnel

Pour étudier la performance de l’algorithme de rejet décrit dans ce chapitre, on considère un vecteur gaussien bi-varié centré, avec une matrice de covariance Σ égale à $\begin{pmatrix} 5 & 2.5 \\ 2.5 & 2 \end{pmatrix}$. Dans cet exemple numérique, on suppose que le sous-espace convexe $C = [-15, -3] \times [-10, 0]$ est la zone admissible. Pour utiliser cet algorithme, il suffit de calculer le mode du vecteur gaussien tronqué à C vérifiant

$$\mu^* = \arg \min_{x \in C} \frac{1}{2} x^\top \Sigma^{-1} x = (-3.0, -1.5).$$

Ensuite, on peut comparer l’algorithme RSM avec l’algorithme de rejet usuel, voir Figure 22 et Figure 23. Sur la Figure 22, on utilise l’algorithme de rejet usuel avec 2000 simulations du vecteur gaussien centré de matrice de covariance Σ . Il est clair que cet algorithme n’est pas très efficace car la moyenne du vecteur gaussien est à l’extérieur de

4.5. COMPARAISON AVEC D'AUTRES MÉTHODES DE REJET

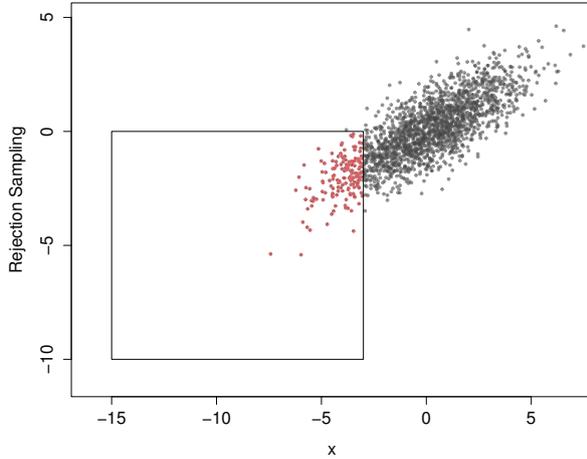


FIGURE 22 – Algorithme de rejet usuel avec 2000 simulations d'un vecteur gaussien centré. Le taux d'acceptation est égal à 7.85%.

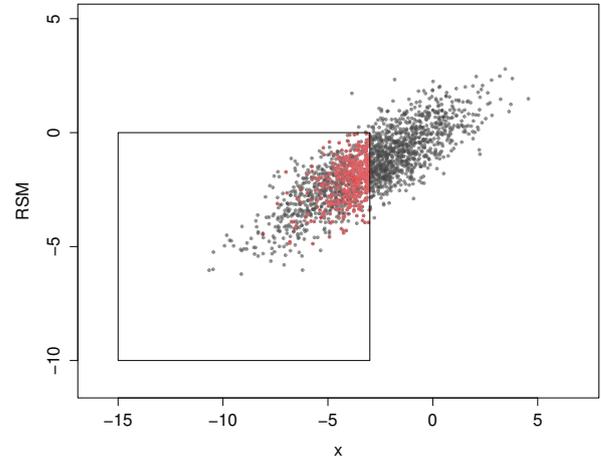


FIGURE 23 – Algorithme de rejet en utilisant le mode dans 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 23.55%.

la zone d'acceptation. Sur la Figure 23, on simule à partir de la distribution translatée au mode avec la même matrice de covariance Σ . Rappelons que l'algorithme proposé est basé sur deux étapes de rejet. La première est de translater la distribution centrée à l'origine jusqu'au mode et dans la deuxième, on vérifie si les points (simulés) sont dans la zone admissible ou non. Remarquons que dans la zone admissible, on a deux types de points (rouge et noir). Les points noirs du rectangle ne respectent pas la contrainte inégalité (4.6). Par contre, les points rouges respectent la contrainte (4.6). Dans ce cas, l'algorithme de rejet proposé est plus efficace que celui de l'algorithme de rejet usuel avec un taux d'acceptation égal à 23.55% contre 7.85%.

Un autre exemple numérique pour montrer l'efficacité de l'algorithme RSM en utilisant un espace convexe plus compliqué. Dans ce cas, notre but est de simuler un vecteur gaussien centré de matrice de covariance $\Sigma = \begin{pmatrix} 4 & 2.5 \\ 2.5 & 2 \end{pmatrix}$ tronqué au sous-espace convexe défini par les contraintes inégalité suivantes :

$$-10 \leq x_2 \leq 0 \quad \text{et} \quad x_1 \geq -15, \quad 5x_1 - x_2 + 15 \leq 0. \quad (4.7)$$

C'est la zone admissible utilisée sur les Figures 24 et 25. On calcule le mode égal à

$$\mu^* = \arg \min_{x \in C} \frac{1}{2} x^\top \Sigma^{-1} x \approx (-3.4, -2.0).$$

Ensuite, on compare l'algorithme de rejet en utilisant le mode (RSM) avec l'algorithme de rejet usuel.

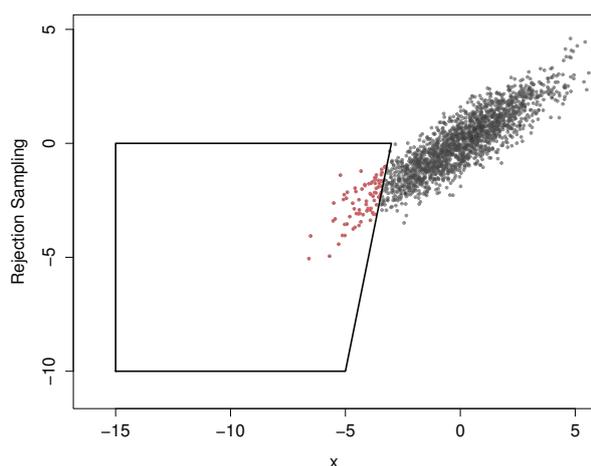


FIGURE 24 – L'algorithme de rejet usuel en utilisant 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 3.8%.

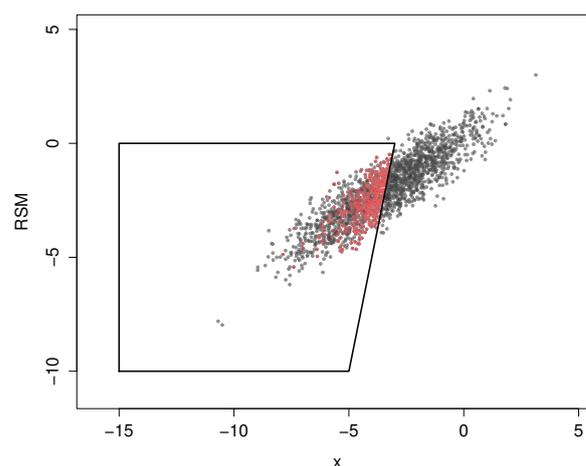


FIGURE 25 – L'algorithme de rejet par le mode en utilisant 2000 simulations. Le taux d'acceptation est égal à 20.5%.

Sur la Figure 24, on applique l'algorithme de rejet usuel avec 2000 simulations d'un vecteur gaussien centré de matrice de covariance Σ . Vu le nombre de points dans la zone admissible C (points rouges), il est clair que l'algorithme de rejet dans ce cas n'est pas très efficace. A nouveau, cela est dû au fait que la moyenne du vecteur gaussien est à l'extérieur de la zone d'acceptation. Sur la Figure 25, on simule à partir du vecteur gaussien translaté au mode avec la même matrice de covariance Σ (c'est la première étape de l'algorithme RSM). On remarque encore la présence de deux types de points (rouges et noirs) dans le sous-espace convexe C . Les points noirs sont dans l'espace admissible C mais ne respectent pas la contrainte inégalité définie par (4.6). Par contre, les points rouges sont dans la zone admissible C et respectent la contrainte inégalité (4.6). Vu le nombre de points rouges, on peut en déduire que l'algorithme RSM est plus efficace que celui de rejet usuel avec un taux d'acceptation de 20.5% contre 3.8%. Dans ce cas, notre algorithme est à peu près 6 fois plus rapide que celui du rejet usuel.

Maintenant, on va étudier l'influence de la performance de l'algorithme RSM avec la dimension. Pour cela on simule une loi normale standard multivariée X tronquée sur la zone convexe $C = [\mu^-, +\infty[^d$, où μ^- est choisi de sorte que $\mathbb{P}(X \in C) = 0.01$. La moyenne de la loi normale multivariée est à l'extérieur de la zone admissible. C'est le cas

4.6. CONCLUSION

TABLE 4.3 – Comparaison entre l’algorithme de rejet usuel et RSM pour des dimensions plus grandes. La zone d’acceptation est $C = [\mu^-, +\infty[^d$.

Dimension d	μ^-	Taux d’acceptation méthode de rejet usuelle (%)	Taux d’acceptation RSM (%)	Gain
1	2.33	1.0	15.0	15.0
2	1.29	1.0	5.2	5.2
3	0.79	1.0	2.5	2.5
4	0.48	1.0	1.5	1.5
5	0.25	1.0	1.2	1.2

où l’algorithme de rejet n’est pas efficace pour simuler une loi multi-normale tronquée. Dans ce cas, une adaptation avec l’algorithme de Gibbs est nécessaire pour améliorer le taux d’acceptation de l’algorithme de rejet. Par la Table 4.3, on remarque que lorsque la dimension devient de plus en plus grande, le paramètre μ^- s’approche de l’origine. Ainsi, le taux d’acceptation de la méthode proposée dans ce chapitre converge vers le taux d’acceptation de la méthode de rejet usuelle.

4.6 Conclusion

La simulation d’un processus gaussien fini-dimensionnel considérée au Chapitre 3 sous les conditions d’interpolation et les contraintes inégalité est équivalente à simuler une loi multi-normale tronquée sur un sous-espace convexe de \mathbb{R}^d . Dans le cadre de ce travail, la méthode de rejet usuelle est relativement efficace lorsque la moyenne du vecteur gaussien tombe dans la zone admissible (sous-espace convexe). Dans le cas contraire, un tel algorithme n’est plus nécessairement efficace et, dans ce cas, il est nécessaire d’accélérer la simulation. Pour cela, on a proposé dans ce chapitre une méthode de rejet (RSM) qui nous permet de simuler (en théorie) une loi multi-normale tronquée à n’importe quel sous-espace convexe de \mathbb{R}^d . Cette méthode n’exige que le calcul du mode de la fonction densité du vecteur gaussien tronqué au sous-espace convexe.

L’idée principale de l’algorithme de rejet est de proposer une fonction de densité facile à générer et qui soit la plus proche possible de la densité qu’on cherche à simuler. Dans l’algorithme RSM, la fonction de densité proposée est obtenue en translatant la moyenne jusqu’au mode et en conservant la même structure de covariance. La constante optimale de rejet a été calculée explicitement. L’algorithme RSM proposé dans ce chapitre est facile à implémenter. Des illustrations numériques pour montrer l’efficacité de l’algorithme proposé sont incluses. La comparaison avec l’algorithme de rejet usuel a été faite et les résultats numériques montrent que l’algorithme du rejet en utilisant le mode (RSM) est plus efficace que celui de rejet usuel. De plus, le gain contre l’algorithme de

rejet usuel est remarquable dans le cas où la probabilité de la zone d'acceptation est de plus en plus faible. Une comparaison avec la méthode de Robert (voir [Robert, 1995]) a été discutée. Dans ce cas, notre méthode est plus efficace que celle de Robert lorsque l'intervalle admissible est large et la probabilité de l'intervalle de troncature est faible. La méthode proposée dans ce chapitre a été appliquée dans le cas où la zone d'acceptation est un sous-espace convexe de \mathbb{R}^d , mais le cas non-convexe est envisageable en utilisant son enveloppe convexe.

4.6. CONCLUSION

Chapitre 5

Validation croisée adaptée aux contraintes de type inégalité pour estimer les paramètres de covariance d'un processus gaussien

Sommaire

5.1	Introduction	97
5.2	Processus gaussien sous contraintes	98
5.3	Approximation finie-dimensionnelle	98
5.4	Estimation des paramètres par validation croisée	99
5.4.1	Validation croisée sans contraintes inégalité	99
5.4.2	Validation croisée avec contraintes inégalité	100
5.4.3	Étude sur un exemple analytique	101
5.4.4	Application réelle de sûreté nucléaire	104
5.5	Conclusion	106

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, l'estimation des paramètres de covariance est étudiée dans le cadre de la régression par processus gaussien sous contraintes inégalité (cf. Chapitre 3). Les méthodes de Validation Croisée (VC) sont envisagées. On s'intéresse au critère de l'Erreur Quadratique Moyenne (EQM) empirique d'une technique de *Leave-One-Out* (LOO) (voir par exemple l'article [Cressie, 1993]). Dans la littérature, les techniques utilisées ne tiennent pas compte de contraintes inégalité pour l'estimation des paramètres. Nous

présentons une méthode de Validation Croisée Adaptée (VCA) à des contraintes linéaires de type inégalité. L'efficacité de l'algorithme proposé a été testée sur des données réelles de sûreté nucléaire en dimension 2.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante : dans la Section 5.2, on rappelle le modèle de processus gaussien fini-dimensionnel capable d'intégrer les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité (cf. Chapitre 3). Ensuite, dans la Section 5.4, on présente la méthode de validation croisée pour estimer les hyper-paramètres de la fonction de covariance et on propose une technique de validation croisée adaptée aux contraintes inégalité. Un critère d'erreur quadratique moyenne empirique adapté est défini. Enfin, deux exemples numériques en dimension 1 et 2 pour étudier l'efficacité de l'algorithme proposé sont inclus.

5.2 Processus gaussien sous contraintes égalité et inégalité

Soit $(Y(\mathbf{x}))_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d}$ un processus gaussien centré de fonction de covariance

$$K : (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \longrightarrow K(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \text{Cov}(Y(\mathbf{u}), Y(\mathbf{v})) \in \mathbb{R}.$$

Dans les exemples numériques de ce chapitre, la fonction de covariance gaussienne est utilisée :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \prod_{k=1}^d \exp\left(-\frac{(x_k - x'_k)^2}{2\theta_k}\right) = \sigma^2 R_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^d,$$

où $R_{\boldsymbol{\theta}}$ est la fonction de corrélation, σ^2 est le paramètre de variance et où $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_d)$ sont les paramètres de portée. L'entrée \mathbf{x} est supposée dans $[0, 1]^d \subset \mathbb{R}^d$. Soit C le sous-espace fonctionnel associé aux contraintes inégalité. On cherche à estimer les paramètres σ^2 et θ_k sachant :

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{x}^{(i)}) &= y_i, & i &= 1, \dots, n \\ Y &\in C, \end{aligned}$$

où les points $\mathbf{x}^{(i)} \in [0, 1]^d$ sont donnés par les lignes de la matrice $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)})^\top \in \mathbb{R}^{n \times d}$.

5.3 Approximation finie-dimensionnelle

Dans cette section, on rappelle brièvement le modèle d'approximation décrit dans le Chapitre 3 et quelques notations. L'idée principale est de remplacer le processus gaussien

initial Y par un PG de dimension fini de la forme :

$$Y^N(\mathbf{x}) := \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$$

où $\xi = (\xi_0, \dots, \xi_N)^\top$ est un vecteur gaussien centré de matrice de covariance notée Γ^N et où les fonctions $(\phi_j)_j$, $j = 0, \dots, N$ sont déterministes. Le choix de ces fonctions et de Γ^N dépendent du type de contraintes. En général, les fonctions de base sont choisies de sorte que l'ensemble des contraintes inégalité sur Y^N soit *équivalent* à un nombre fini de contraintes linéaires sur les coefficients ξ_j . Par suite, le problème de simulation du processus conditionnel équivaut à la simulation d'un vecteur gaussien ξ restreint au sous-espace convexe défini par :

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{x}^{(i)}) &= y_i, \quad i = 1, \dots, n, \\ \xi &\in C_\xi, \end{aligned}$$

où $C_\xi = \left\{ \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{N+1} : \sum_{j=0}^N c_j \phi_j \in C \right\}$.

5.4 Validation croisée pour estimer les hyper-paramètres de la fonction de covariance

Rappelons les deux techniques d'estimation classiques. La première est l'Estimation par Maximum de Vraisemblance (EMV) et la deuxième par Validation Croisée (VC). Une comparaison détaillée entre ces deux méthodes (EMV et VC) dans le cas où la famille paramétrique de fonctions de covariance est mal (ou bien) spécifiée, a été faite dans [Bachoc, 2013]. Dans le premier cas (mal spécifié), la VC est plus robuste que l'EMV. Dans le deuxième cas, l'influence asymptotique de la régularité du plan d'expériences sur les estimateurs par MV et VC est étudiée. Les résultats montrent la consistance et la normalité asymptotique, pour ces deux estimateurs. Dans la section suivante, on rappelle la méthode de validation croisée utilisée dans la littérature. L'adaptation au cas de contraintes inégalité est proposée en Section 5.4.2.

5.4.1 Validation croisée sans contraintes inégalité

La méthode de validation croisée est basée sur les données d'observation et la moyenne de krigeage comme estimateur. Pour estimer les hyper-paramètres θ , l'idée est de minimiser l'Erreur Quadratique Moyenne (EQM) empirique d'une technique de *Leave-One-Out*

5.4. ESTIMATION DES PARAMÈTRES PAR VALIDATION CROISÉE

(LOO) :

$$\hat{\theta}_{VC} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_{i,\theta}(y_{-i}))^2, \quad (5.1)$$

où $\hat{y}_{i,\theta}(y_{-i}) = \mathbb{E}_{\theta}(y_i | y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n)$. Bachoc dans son article [Bachoc, 2013] a montré que cet estimateur est calculable en minimisant la fonction suivante :

$$f_{VC}(\theta) = \mathbf{y}^{\top} \Gamma_{\theta}^{-1} \text{diag}(\Gamma_{\theta}^{-1})^{-2} \Gamma_{\theta}^{-1} \mathbf{y},$$

où Γ_{θ} est la matrice de corrélation $(R_{\theta}(x^{(i)} - x^{(j)}))_{1 \leq i, j \leq n}$ et où $\text{diag}(\Gamma_{\theta}^{-1})$ est la matrice obtenue en fixant à zéro tous les termes en dehors de la diagonale. Le paramètre de variance σ^2 est estimé en utilisant le critère suivant :

$$C_{LOO} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{y}_{i,\hat{\theta}_{VC}}(y_{-i}))^2}{\sigma^2 c_{i,-i,\hat{\theta}_{VC}}^2}, \quad (5.2)$$

où $c_{i,-i,\hat{\theta}_{VC}}^2 = \text{Var}(y_i | y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n)$. Le paramètre de variance σ^2 est calculé de sorte que le critère défini dans (5.2) soit égal à 1, voir l'article [Cressie, 1993] :

$$\hat{\sigma}_{VC}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{y}_{i,\hat{\theta}_{VC}}(y_{-i}))^2}{c_{i,-i,\hat{\theta}_{VC}}^2},$$

où $\hat{\theta}_{VC}$ est calculé par l'équation (5.1).

5.4.2 Validation croisée avec contraintes inégalité

La méthodes de VC n'est pas adaptée aux contraintes de type inégalité, car la moyenne de krigeage usuelle ne respecte pas en général les contraintes inégalité. L'idée est d'utiliser l'estimateur *mode* (Maximum *A Posteriori*) qui vérifie les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité. Cet estimateur (cf. Chapitre 3, Section 3.5) est de la forme suivante :

$$M_{KI}(x) = \sum_{j=0}^N \mu_j \phi_j(x), \quad (5.3)$$

où $\mu = (\mu_0, \dots, \mu_N)^{\top}$ est la solution du problème d'optimisation quadratique suivant :

$$\mu = \arg \min_{\mathbf{c} \in I_{\xi} \cap C_{\xi}} \left(\frac{1}{2} \mathbf{c}^{\top} (\Gamma^N)^{-1} \mathbf{c} \right).$$

Le vecteur μ est vu comme le mode du vecteur gaussien ξ restreint à $I_{\xi} \cap C_{\xi}$, où $I_{\xi} = \left\{ \xi \in \mathbb{R}^{N+1} : \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{x}^{(i)}) = y_i \right\}$. Un tel estimateur vérifie les conditions

d'interpolation et respecte les contraintes inégalité sur tout le domaine. De plus, il ne dépend pas du paramètre de variance σ^2 (comme le vecteur μ).

Pour adapter la méthode de VC aux contraintes de type inégalité, on propose de remplacer la moyenne de krigeage usuelle par cet estimateur *mode* dans le critère défini par (5.1). Dans ce cas, l'EQM empirique adapté aux contraintes s'écrit :

$$\hat{\theta}_{VCA} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - M_{i,\theta}(y_{-i}))^2, \quad (5.4)$$

où $M_{i,\theta}(y_{-i}) = M_{KI}(y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n; \theta)$ et où M_{KI} est définie par (5.3). De plus, le paramètre de variance est estimé en utilisant le critère suivant :

$$C_{LOOA} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - M_{i,\hat{\theta}_{VCA}}(y_{-i}))^2}{\sigma^2 \hat{c}_{i,-i,\hat{\theta}_{VCA}}^2}, \quad (5.5)$$

où $\hat{c}_{i,-i,\hat{\theta}_{VCA}}^2$ est cette fois la variance de krigeage sous contraintes sans tenir compte de la $i^{\text{ème}}$ observation. En pratique, elle est calculée par simulation. Le paramètre de variance est calculé tel que le critère défini dans l'équation (5.5) soit égal à 1 :

$$\hat{\sigma}_{VCA}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - M_{i,\hat{\theta}_{VCA}}(y_{-i}))^2}{\hat{c}_{i,-i,\hat{\theta}_{VCA}}^2},$$

où $\hat{\theta}_{VCA}$ est calculé par l'équation (5.4).

5.4.3 Étude sur un exemple analytique

Le but de cette section est d'étudier l'estimation des hyper-paramètres de la fonction de covariance en utilisant une fonction analytique et de montrer que la méthode de validation croisée adaptée aux contraintes (cf. Section 5.4.2) est plus efficace que les méthodes de VC et de MV usuelles. On compare les méthodes en calculant le critère de l'EQM empirique. Pour cela, on considère la fonction analytique $f(x) = \frac{-1}{100 \times (x+0.1)^3}$. C'est une fonction croissante sur $[0, 1]$ et on la suppose connue en $n = 9$ points (points en noir sur la Figure 26).

La Figure 27 montre l'estimateur *mode* sans tenir compte de l'une des observations. Sur la Figure 27a, la courbe rouge représente l'estimateur *mode* sans tenir compte de la première observation (à l'origine). La valeur de cette courbe à l'origine représente la valeur de la fonction $M_{i,\theta}(y_{-i})$, où $i = 1$ qui est définie dans l'équation (5.4). Sur la Figure 27b, le

5.4. ESTIMATION DES PARAMÈTRES PAR VALIDATION CROISÉE

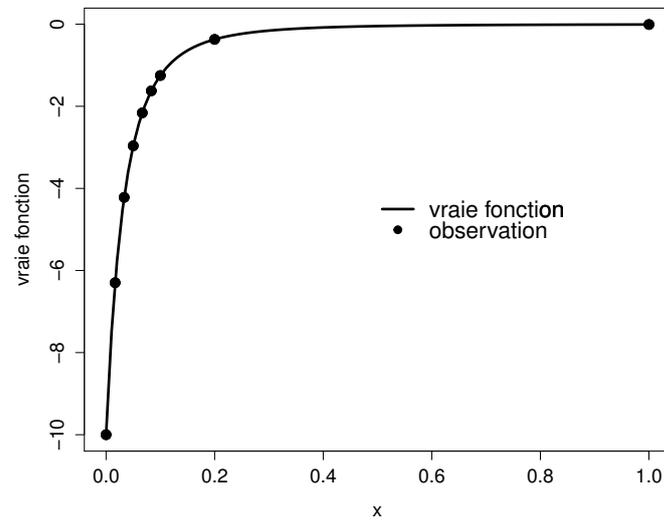


FIGURE 26 – $n = 9$ points d'évaluation d'une fonction analytique.

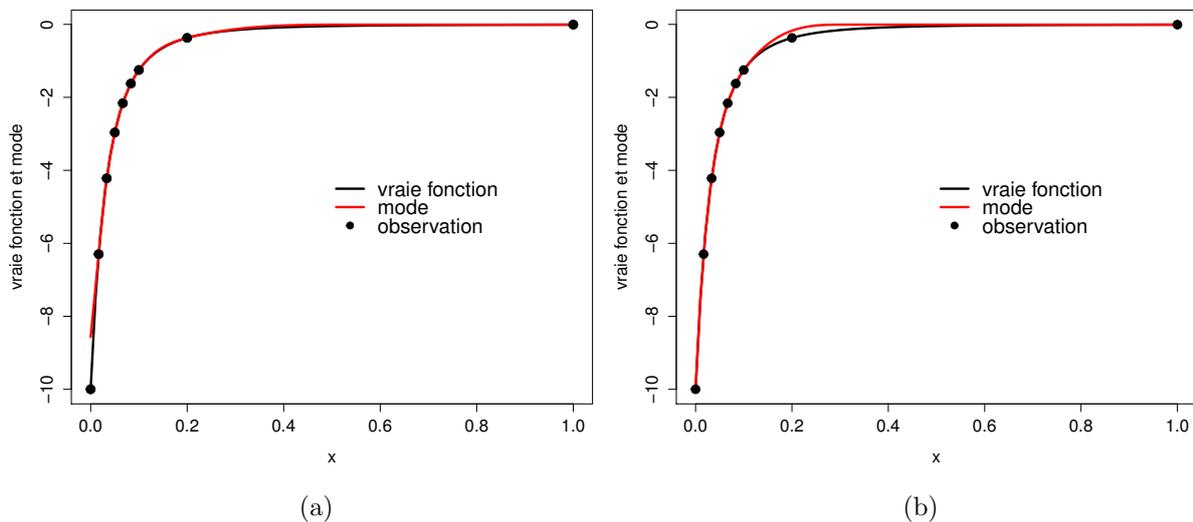


FIGURE 27 – L'estimateur mode sans tenir compte de la première observation (Figure 27a) et sans l'avant-dernière (Figure 27b). Le mode est monotone sur tout le domaine et interpole les autres points d'observation.

mode est illustré sans tenir compte de l'avant-dernière observation. Remarquons que dans ces deux figures le mode reste monotone sur le domaine entier. Pour estimer le paramètre θ par la méthode de validation croisée adaptée aux contraintes, il suffit de minimiser la fonction suivante :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - M_{i,\theta}(y_{-i}))^2, \quad (5.6)$$

qui ne dépend pas du paramètre de variance σ^2 .

Sur la Figure 28, on trace l'EQM empirique qu'on cherche à optimiser et définie par l'équation (5.6). En utilisant le package DiceKriging [Roustant et al., 2012], on trouve que $\hat{\theta}_{VC} = 0.06$ par la méthode de validation croisée usuelle et $\hat{\theta}_{MV} = 0.11$ par maximum de vraisemblance. La valeur de l'EQM empirique vaut 8.60 et 5.22 pour $\hat{\theta}_{VC}$ et $\hat{\theta}_{ML}$ respectivement. Maintenant, si l'on optimise cette fonction, on trouve que la valeur optimale est 2.44, atteinte au point $\hat{\theta}_{VCA} = 0.75$. La droite horizontale en tirets rouges représente cette valeur optimale (voir Figure 28). Si l'on calcule la valeur de l'EQM empirique par LOO (5.1) (sans tenir compte des contraintes) au point $\hat{\theta}_{VC} = 0.06$, on obtient la valeur 2.62 plus grande que la valeur 2.44 obtenu par VC adaptée.

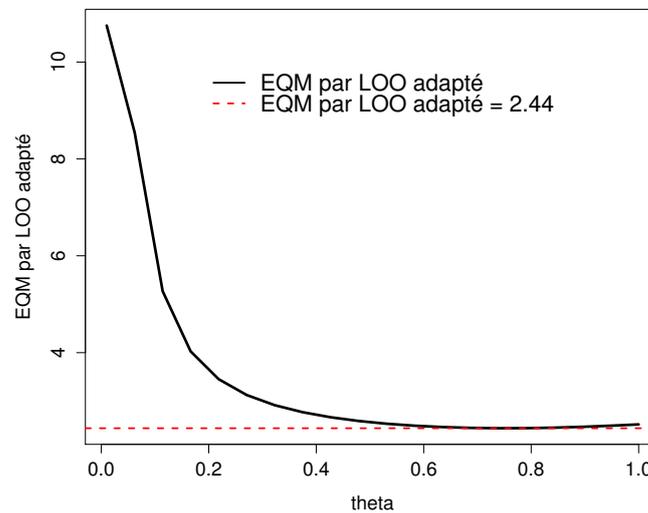


FIGURE 28 – L'EQM empirique par LOO adapté qui est définie dans l'équation (5.6) (courbe noire) et la valeur optimale de cette fonction qui vaut 2.44 au point $\hat{\theta}_{VCA} = 0.75$.

Sur la Figure 29, on trace la différence en valeur absolue entre l'estimateur mode et la vraie fonction. La courbe en bleue (resp. en rouge) représente cette différence en utilisant

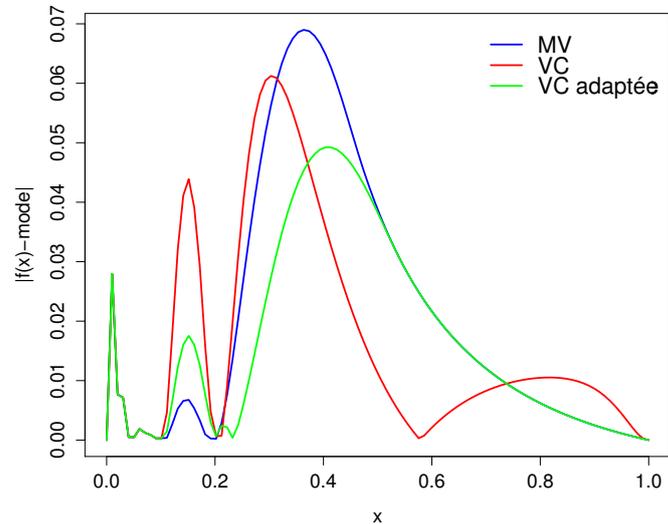


FIGURE 29 – La fonction $|f(x) - M_{KI}(x, \theta)|$ en utilisant le paramètre θ qui est estimé par les méthodes suivantes : Maximum de Vraisemblance (courbe en bleue), VC non adaptée (courbe en rouge) et VC adaptée aux contraintes (courbe en vert).

le paramètre de portée θ estimé par la méthode de Maximum de Vraisemblance (resp. VC sans tenir compte de la monotonie). La courbe en vert correspond au cas où le paramètre θ est estimé par la méthode de VC adaptée aux contraintes. La première remarque est que le maximum de l'erreur est plus faible pour la VC adaptée. Pour un critère intégral, on obtient :

$$\int_0^1 |f(x) - M_{KI}(x, \theta)| dx = \begin{cases} 2.14 \times 10^{-2} & \text{pour } \theta = \hat{\theta}_{MV}, \\ 1.72 \times 10^{-2} & \text{pour } \theta = \hat{\theta}_{VC}, \\ 1.71 \times 10^{-2} & \text{pour } \theta = \hat{\theta}_{VCA}, \end{cases}$$

ce qui est en faveur d'une technique de validation croisée adaptée.

5.4.4 Application réelle de sûreté nucléaire

On étudie la réactivité neutronique d'une sphère d'uranium, modélisant l'expérience Godiva, réalisée dans les années 50 au laboratoire de Los Alamos au Nouveau-Mexique (https://en.wikipedia.org/wiki/Godiva_device). Physiquement, le comportement de la réactivité neutronique de la sphère est nécessairement croissant selon les deux paramètres considérés : le rayon (entre 0 et 20 cm) et la densité massique (entre 10 et 20 g/cm³) de l'uranium.

Le but de cette section est d'étudier la performance du mode comme estimateur et de le comparer avec la moyenne de krigeage usuelle. Pour cela, on considère des données réelles (voir Figure 30a). Ces observations ($n = 121$) sont réalisées sur le carré $[10, 20] \times [0, 20]$ et respectent les contraintes de monotonie (croissante) par rapport aux deux variables. Sur la Figure 30b, on représente l'estimateur mode. Si l'on calcule la moyenne de krigeage usuelle, on a la même fonction à cause du nombre important de données. L'idée est d'utiliser ces données pour tester la performance du mode comme estimateur. Pour cela, on estime les hyper-paramètres de la fonction de covariance en utilisant la VC adaptée aux contraintes décrite dans Section 5.4.2 avec un nombre plus restreint d'observations.

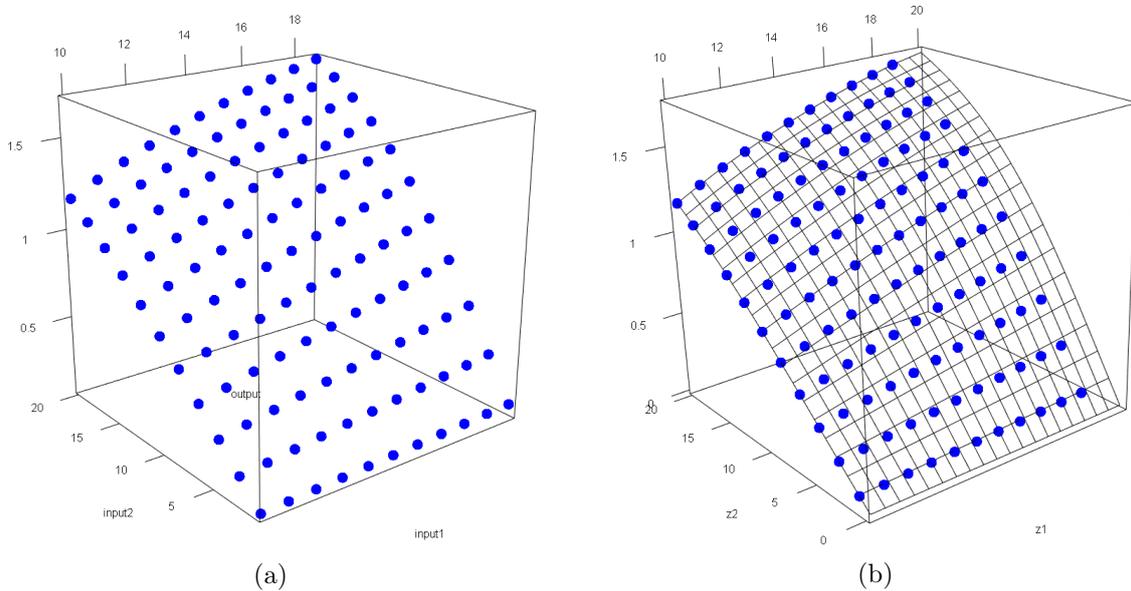


FIGURE 30 – Les observations en dimension 2 (Figure 30a). La fonction mode (Figure 30b) sous les conditions d'interpolation et les contraintes de monotonie.

Sur la Figure 31, on choisit $n = 5$ points d'observation et on utilise le noyau gaussien bi-varié suivant :

$$K((x_1, x_2), (x'_1, x'_2)) = \exp\left(-\frac{(x_1 - x'_1)^2}{2\theta_1^2} - \frac{(x_2 - x'_2)^2}{2\theta_2^2}\right),$$

où (θ_1, θ_2) sont les deux paramètres de portée. Sur la Figure 31a, on trace la moyenne de krigeage usuelle avec les paramètres de portée $\hat{\theta}_{VC} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) = (9.05, 9.10)$ estimés par VC non adaptée. Les contraintes de monotonie (croissante) ne sont pas respectées sur le domaine contrairement à la Figure 31b, où la fonction mode est représentée en utilisant les paramètres de portée $\hat{\theta} = (25.17, 10.57)$ estimés par VC adaptée aux contraintes. Sur

5.5. CONCLUSION

la Figure 32, on compare les valeurs estimées aux vraies valeurs (connues en $121 - 5 = 116$ points test) en utilisant respectivement la moyenne de krigeage usuelle (Figure 32a) et le mode (Figure 32b). Il est clair que le mode domine la moyenne de krigeage usuelle comme estimateur. De manière plus précise, considérons le critère Q_2 de variance expliquée suivant :

$$Q_2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_{-i})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}.$$

Il vaut 0.98 pour la méthode utilisant le mode comme estimateur (\hat{y}_i) et vaut 0.69 pour celle utilisant la moyenne de krigeage usuelle.

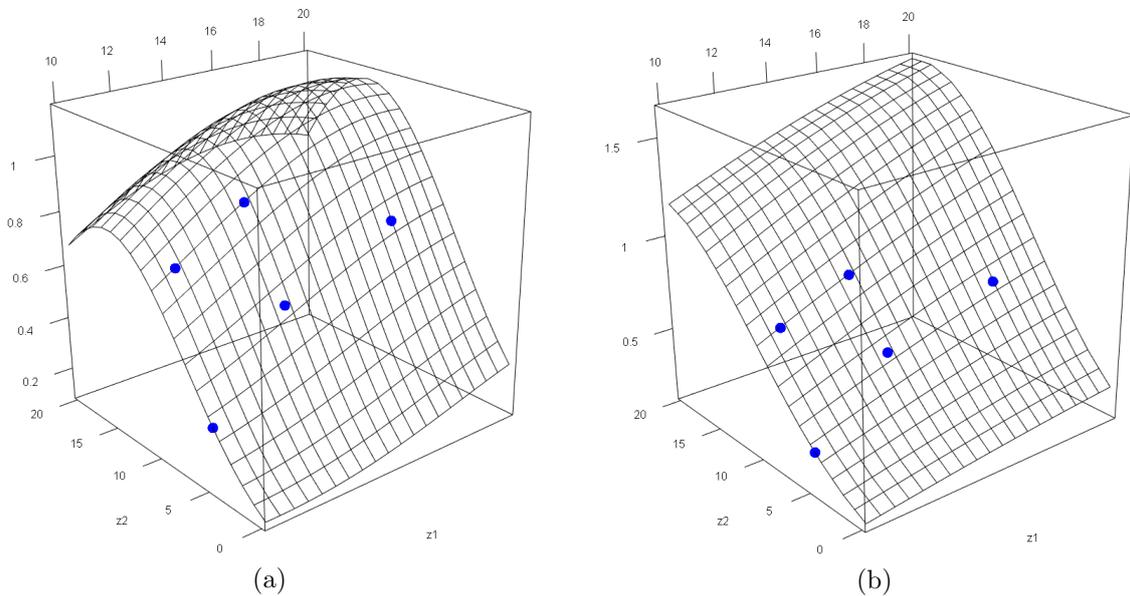


FIGURE 31 – La moyenne de krigeage usuelle en utilisant le noyau gaussien bi-varié et les paramètres de portée $\hat{\theta}_{VC} = (\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2) = (9.05, 9.10)$ estimés par VC (Figure 31a). Le mode en utilisant le noyau gaussien et les paramètres $\hat{\theta} = (25.17, 10.57)$ estimés par VC adaptée aux contraintes (Figure 31b).

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, on a proposé une technique de validation croisée pour estimer les hyper-paramètres d'un modèle de régression par processus gaussien qui soit adaptée au cas de contraintes inégalité. Un critère d'erreur quadratique moyenne empirique adapté aux contraintes est proposé. Sur un exemple numérique en dimension 1, on montre que la méthode de validation croisée adaptée est plus efficace que la méthode de VC non adaptée et le maximum de vraisemblance. Cette méthode a aussi été étudiée en utilisant

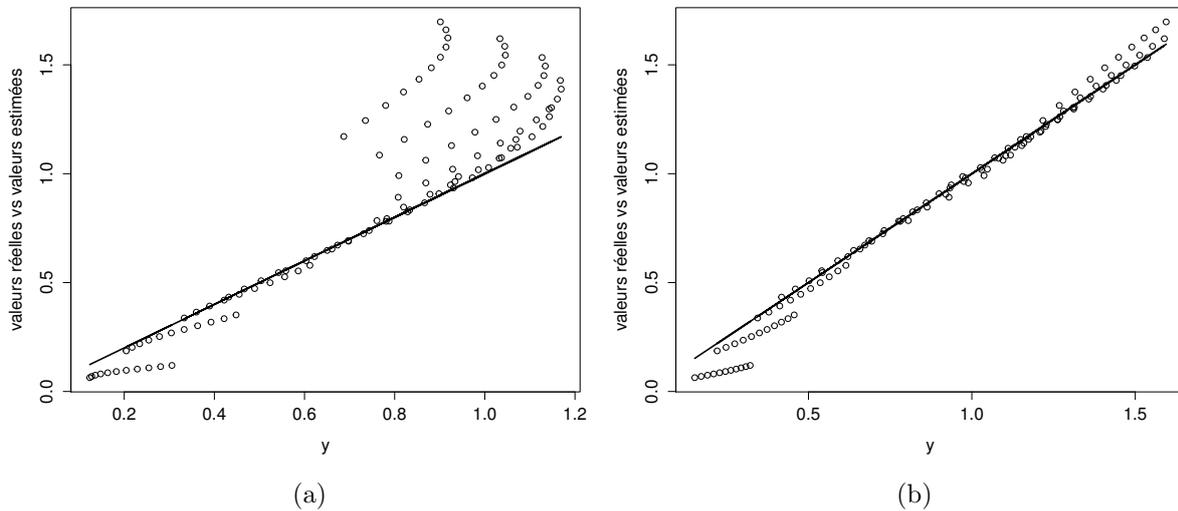


FIGURE 32 – Les valeurs estimées contre les vraies valeurs en utilisant la moyenne de frigeage usuelle comme estimateur (Figure 32a) et le mode (Figure 32b).

des données réelles de sûreté nucléaire en dimension 2. Les résultats montrent son efficacité en liaison avec l'estimateur mode proposé pour estimer la vraie fonction.

5.5. CONCLUSION

Quatrième partie

**Aspects théoriques : correspondance
entre régression par processus
gaussien et splines dans le cas de
contraintes linéaires de type inégalité**

Chapitre 6

Interpolation optimale dans les RKHS sous contraintes linéaires de type inégalité

Sommaire

6.1	Introduction	112
6.2	Position du problème	112
6.3	Optimisation discrétisée	115
6.3.1	Le sous-espace d'approximation H_N et les opérateurs π_N et ρ_N	115
6.3.2	Existence et unicité de la solution du problème (P_N)	120
6.3.3	Analyse de la convergence	122
6.3.4	Implémentation du problème (P_N)	126
6.4	Illustration numérique	127
6.4.1	Contraintes de borne	127
6.4.2	Contraintes de monotonie en dimension 1	128
6.4.3	Cas d'un nombre fini de contraintes inégalité	129
6.4.4	Contraintes de monotonie en dimension $d \geq 2$	131
6.5	Cas des splines	135
6.5.1	Spline cubique d'interpolation sous contraintes	135
6.5.2	Spline cubique sous contrainte de borne	138
6.5.3	Spline cubique monotone	138
6.6	Conclusion	144

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, le problème d'interpolation optimale dans les RKHS sous contraintes de type inégalité est considéré (voir l'approche déterministe du Chapitre 2). On étudie la convergence du schéma d'approximation correspondant en réalité au modèle d'approximation de l'approche probabiliste (voir Chapitre 7). On montre que la solution d'un tel problème converge uniformément vers la spline d'interpolation contrainte solution du problème d'optimisation dans le RKHS. L'algorithme correspondant est facile à implémenter. Quelques exemples numériques avec des contraintes de borne et de monotonie sont illustrés. Une comparaison avec les splines cubiques monotones¹ a été également réalisée en terme de minimisation de l'énergie linéaire.

6.2 Position du problème

Soit X un ensemble non vide de \mathbb{R}^d ($d \geq 1$) et $E = \mathcal{C}^0(X)$ l'espace des fonctions continues sur X . On se donne n observations $(x^{(i)}, y_i)$, $i = 1, \dots, n$ où les $x^{(i)}$ sont des points distincts de X . On définit I l'espace des fonctions interpolantes :

$$I := \{f \in E, f(x^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n\}.$$

Soit C un sous-espace convexe fermé de E . On considère le problème d'optimisation suivant :

$$\min_h \{\|h\|_H^2, h \in H \cap C \cap I\}, \quad (P)$$

où H est un sous-espace hilbertien de E (voir Chapitre 2, Section 2.3). Dans ce cas, $H \cap C \cap I$ est un sous-espace convexe fermé de H ². Le noyau reproduisant (n.r.) K de H est une fonction continue symétrique de type positif (voir Chapitre 2) :

$$K : (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \longrightarrow K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := (K(\cdot, \mathbf{y}), K(\cdot, \mathbf{x}))_H \in \mathbb{R}.$$

Le choix de différents noyaux conduit à différents critères de régularisation pour le problème d'interpolation. Par la propriété de reproduction (voir Chapitre 2, Section 2.2), les conditions d'interpolation s'écrivent :

$$\forall h \in H \cap I, \quad h(x^{(i)}) = (h, K(\cdot, x^{(i)}))_H = y_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.1)$$

1. Ce sont les fonctions qui minimisent le critère d'énergie linéaire ou l'intégrale de la dérivée seconde carré : $\int f''(x)^2 dx$.

2. L'application identité $id : H \longrightarrow E$ est une fonction continue et $H \cap C = id^{-1}(C)$.

En pratique, l'espace convexe C est défini par une infinité de contraintes linéaires de type inégalité. Par exemple en dimension 1, la monotonie est assurée par la positivité de la dérivée sur tout le domaine. Le problème d'optimisation sans tenir compte des contraintes inégalité (cas où $C = E$)

$$\min_h \{ \|h\|_H^2, h \in H \cap I \}, \quad (Q)$$

a été résolu depuis longtemps (voir par exemple [Kimeldorf and Wahba, 1971]). Dans le cas où $H \cap I \neq \emptyset$, le problème (Q) admet une solution unique. Soit \mathcal{I} l'opérateur d'interpolation de H dans \mathbb{R}^n défini par :

$$\mathcal{I}(h) := (h(x^{(1)}), \dots, h(x^{(n)})).$$

Par l'équation (6.1), \mathcal{I} est un opérateur linéaire d'image contenue dans \mathbb{R}^n . Pour tout $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\check{h} = \mathcal{I}^\dagger(\mathbf{y})$ est la solution unique de (Q), où \mathcal{I}^\dagger est l'inverse généralisé ou l'inverse Moore-Penrose de \mathcal{I} (voir [Nair, 2009]). Si la matrice $\mathbb{K} = (K(x^{(i)}, x^{(j)}))_{1 \leq i, j \leq n}$ est inversible, $\check{h} = \mathcal{I}^\dagger(\mathbf{y})$ peut s'écrire (voir Chapitre 2, Corollaire 1 ou Chapitre 6, Proposition 5) :

$$\check{h}(x) = \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{y}, \quad (6.2)$$

où $\mathbf{k}(x) = (K(x, x^{(1)}), \dots, K(x, x^{(n)}))^\top$ et où $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$.

Dans certaines applications en science ou ingénierie, la fonction à interpoler vérifie certaines contraintes de type inégalité (e.g. les contraintes de monotonie, de convexité, etc). Ces contraintes correspondent à l'espace convexe C . En général, la solution obtenue par un principe d'optimisation sous conditions d'interpolation et contraintes inégalité porte le nom de 'spline d'interpolation sous contraintes' (voir [Andersson and Elfving, 1991] et [Utreras, 1982]). Le point de départ est la caractérisation de la solution du problème (P) comme projection orthogonale sur l'espace convexe C d'une certaine combinaison linéaire finie (avec des coefficients inconnus) des fonctions $K(\cdot, x^{(i)})$, $i = 1, \dots, n$. Les coefficients sont définis par les conditions d'interpolation mais cela conduit à un système d'équations non linéaires. De manière plus précise, si $\widehat{H \cap C} \cap \mathcal{I}^{-1}(\{\mathbf{y}\}) \neq \emptyset$, alors le problème (P) admet une solution unique de la forme :

$$\hat{h} = P_C(\mathcal{I}^*(\alpha)) = P_C \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i K(\cdot, x^{(i)}) \right),$$

où $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^\top$ est un vecteur de \mathbb{R}^n , \mathcal{I}^* est l'opérateur adjoint de \mathcal{I} et où P_C est la projection orthogonale sur l'espace convexe C (voir [Micchelli and Utreras, 1988], Théorème 3.2, pp. 739). Inversement, si pour un vecteur arbitraire α , $\hat{h} = P_C(\sum_i \alpha_i K(\cdot, x^{(i)}))$ satisfait la condition $\mathcal{I}(\hat{h}) = \mathbf{y}$, alors \hat{h} est la solution du problème

6.2. POSITION DU PROBLÈME

(*P*) (voir [Andersson and Elfving, 1991], Théorème 2.1, pp. 304). Sous des hypothèses particulières (voir [Micchelli and Utreras, 1988]), si $\hat{\alpha}$ est la solution du problème dual suivant

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \|P_C(\mathcal{I}^*(\alpha))\|_H^2 - (\alpha, \mathbf{y}), \alpha \in \mathbb{R}^n \right\},$$

alors $\hat{h} = P_C(\mathcal{I}^*(\hat{\alpha}))$ est la solution du problème (*P*). Dans le cas général (voir [Micchelli and Utreras, 1988], Théorème 3.2), $\hat{\alpha}$ est la solution du problème dual suivant :

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathcal{I}^*(\alpha)\|_H^2 - \frac{1}{2} \|\mathcal{I}^*(\alpha) - P_C(\mathcal{I}^*(\alpha))\|_H^2 - (\alpha, \mathbf{y}), \alpha \in \mathbb{R}^n \right\}.$$

Ce dernier problème n'est pas facile à résoudre. Comme Andersson et Elfving le soulignent dans leur papier [Andersson and Elfving, 1991], la difficulté est liée au calcul de la projection orthogonale P_C . L'opérateur de projection P_C pour certains cas de contraintes a été étudié. Laurent (voir l'article [Laurent, 1980]) propose un algorithme pour résoudre ce type de problème d'optimisation. Cet algorithme a été appliqué par Utreras et Varas dans [Utreras and Varas, 1991] pour le calcul d'une spline plaque mince monotone (*K-Monotone Thin Plate Spline*). L'algorithme est basé sur le principe des itérations en utilisant le théorème de Kuhn et Tucker. De nouveau, le coût de calcul de l'algorithme dual est encore élevé [Utreras and Varas, 1991].

Dans ce chapitre, on propose une méthode d'approximation pour résoudre le problème (*P*). Elle est destinée à surmonter le problème de coût calculatoire et à faciliter l'implémentation. Pour cela, on définit un problème d'optimisation discrétisé (P_N) dans un espace de dimension fini H_N sous les mêmes conditions d'interpolation et contraintes inégalité :

$$\min_h \{ \|h\|_{H_N}^2, h \in H_N \cap C \cap I \}. \quad (P_N)$$

Sous certaines hypothèses naturelles, on démontre que les deux problèmes d'optimisation (*P*) et (P_N) admettent une solution unique et que la solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) converge uniformément vers la solution du problème (*P*).

Ce chapitre est organisé de la manière suivante : dans la Section 6.3, on décrit le problème d'optimisation discrétisé pour approcher le problème initial (*P*) et on étudie les propriétés de convergence. Dans la Section 6.4, des exemples numériques sous contraintes de type inégalité (comme les contraintes de borne et de monotonie) en dimension 1 et 2 sont données. L'algorithme a été appliqué également au cas de splines classiques sous contraintes inégalité. Une comparaison avec des algorithmes existants pour le calcul de splines cubiques monotones a été faite dans la Section 6.5.

6.3 Problème d'optimisation discrétisé

On considère le problème d'optimisation convexe de dimension infinie suivant

$$\min\{J(h), h \in H \cap C\}, \quad (O)$$

où J est un critère réel défini sur l'espace de Hilbert H et où C est un ensemble convexe fermé de H .

Par analogie avec la méthode des éléments finis (voir la méthode de Ritz-Galerkin [Gander and Wanner, 2012]), le problème d'optimisation discrétisé s'écrit sous la forme :

$$\min\{J(\rho_N h_N), h_N \in H_N \cap C_N\}, \quad (O_N)$$

où $H_N = \pi_N(H)$ est un espace de dimension finie, π_N est un opérateur linéaire de H dans H_N (projection), ρ_N est un opérateur d'extension de H_N dans H et où $C_N := \{h_N \in H_N \text{ tel que } \rho_N(h_N) \in C\}$ (voir [Cherruault, 1968] et [Loridan, 1971]). Si $\pi_N(C) \subset C_N$ et sous quelques propriétés de stabilité et de consistance sur π_N et ρ_N , on peut démontrer que $J(u_N) \rightarrow J(u)$ et $u_N \rightharpoonup u$ faiblement dans H , où u est la solution (unique) de (O) et où u_N la solution de (O_N) .

L'approche ici est différente, on ne discrétise pas l'espace des contraintes mais on discrétise le critère :

$$\min\{J_N(h_N), h_N \in H_N \cap C\}.$$

Cependant, l'analyse de ce problème d'optimisation discrétisé nous conduit à considérer un triplet (H_N, π_N, ρ_N) , où π_N un opérateur linéaire de E dans $H_N \subset E$ et ρ_N un opérateur de H_N dans H . Dans cette section, on se place dans l'espace de Banach $\mathcal{C}^0(X)$ ³, où X est un compact de \mathbb{R}^d . Soient \hat{h} et \hat{h}_N les solutions des problèmes (P) et (P_N) respectivement. Dans la suite, on démontre que

$$\hat{h}_N \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \hat{h} \quad \text{dans l'espace } E.$$

6.3.1 Le sous-espace d'approximation H_N et les opérateurs π_N et ρ_N

Pour simplifier la présentation, on suppose que le compact X est l'intervalle unité $[0, 1]$. Soit Δ_N , $N \geq 1$ une subdivision de $[0, 1]$ telle que :

$$\Delta_N : \quad 0 = t_{N,0} < t_{N,1} < \dots < t_{N,N} = 1, \quad \Delta_N \subset \Delta_{N+1},$$

3. \mathcal{C}^0 désigne l'espace des fonctions continues sur X muni de la topologie uniforme.

6.3. OPTIMISATION DISCRÉTISÉE

et $\delta_N = \max \{|t_{N,i+1} - t_{N,i}|, i = 0, \dots, N-1\} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0$. Pour tout N , on définit le sous-espace d'approximation H_N de $E = \mathcal{C}^0(X)$ comme l'espace des fonctions continues affines par morceaux associées à la subdivision Δ_N . La base canonique de H_N est formée des fonctions chapeau $[\phi_{N,0}, \dots, \phi_{N,N}]$:

$$j = 1, \dots, N-1 \quad \phi_{N,j}(t) := \begin{cases} \frac{t-t_{N,j-1}}{t_{N,j}-t_{N,j-1}}, & t \in [t_{N,j-1}, t_{N,j}], \\ \frac{t_{N,j+1}-t}{t_{N,j+1}-t_{N,j}}, & t \in [t_{N,j}, t_{N,j+1}], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.3)$$

$$\phi_{N,0}(t) := \begin{cases} \frac{t_{N,1}-t}{t_{N,1}-t_{N,0}}, & t \in [t_{N,0}, t_{N,1}], \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad \phi_{N,N}(t) := \begin{cases} \frac{t-t_{N,N-1}}{t_{N,N}-t_{N,N-1}}, & t \in [t_{N,N-1}, t_{N,N}], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On cherche à définir les opérateurs $\pi_N : E \rightarrow H_N$, $\rho_N : H_N \rightarrow H$ et une norme hilbertienne $\|\cdot\|_{H_N}$ sur H_N tels que π_N et ρ_N soient stables, i.e.

$$\begin{aligned} \forall h \in H, \quad & \|\pi_N(h)\|_{H_N} \leq \|h\|_H, \\ \forall h_N \in H_N, \quad & \|\rho_N(h_N)\|_H \leq \|h_N\|_{H_N}, \end{aligned}$$

avec de plus π_N et ρ_N consistants, i.e.

$$\forall h \in H, \quad \rho_N \circ \pi_N(h) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} h \quad \text{dans } H.$$

Proposition 4. Soit π_N l'opérateur de E dans H_N défini par :

$$\forall f \in E, \quad \pi_N(f) = \sum_{j=0}^N f(t_{N,j}) \phi_{N,j}.$$

Alors, $\pi_N \circ \pi_N = \pi_N$ et

$$\pi_N(f) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} f \quad \text{dans } E.$$

Preuve. Voir la preuve de la deuxième propriété de la Proposition 1. □

Remarque 5. Supposons $J(h) = \|h\|_H^2$ dans (O). Si $\|\rho_N h_N\|_H = \|h_N\|_{H_N}$, le problème (O_N) est un problème de projection sur un convexe en dimension finie. On va construire l'opérateur ρ_N et la norme associée à l'espace H_N de manière à satisfaire cette dernière égalité.

On considère l'opérateur d'interpolation $\mathcal{I}_N : H \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ défini par

$$\mathcal{I}_N(h) := (h(t_{N,0}), \dots, h(t_{N,N})).$$

Par la propriété de reproduction, on a

$$\mathcal{I}_N(h) = ((h, K(\cdot, t_{N,0}))_H, \dots, (h, K(\cdot, t_{N,N}))_H). \quad (6.4)$$

Par suite, \mathcal{I}_N est un opérateur borné et pour tout $y \in \mathbb{R}^{N+1}$, le problème d'optimisation suivant :

$$\min_{h \in H} \{ \|h\|_H^2, h(t_{N,j}) = y_j, j = 0, \dots, N \},$$

admet une solution unique $\tilde{h} = \mathcal{I}_N^\dagger(y)$. On définit l'opérateur $\rho_N : H_N \rightarrow H$ de la manière suivante :

$$\forall h_N \in H_N, \quad \rho_N(h_N) := \mathcal{I}_N^\dagger(c_{h_N}),$$

où $c_{h_N} := (h_N(t_{N,0}), \dots, h_N(t_{N,N}))^\top$.

On suppose dans la suite que la matrice $\Gamma^N := (K(t_{N,i}, t_{N,j}))_{0 \leq i, j \leq N}$ est *inversible* pour tout N .

Proposition 5. *Pour tout $h_N \in H_N$, on a*

$$\rho_N(h_N) = \mathbf{k}(\cdot)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_{h_N}, \quad (6.5)$$

où $\mathbf{k}(\cdot) = (K(\cdot, t_{N,0}), \dots, K(\cdot, t_{N,N}))^\top$. De plus,

$$\|\rho_N(h_N)\|_H^2 = c_{h_N}^\top (\Gamma^N)^{-1} c_{h_N}. \quad (6.6)$$

Preuve. Par définition, on a $\rho_N(h_N) \in \text{Ker}(\mathcal{I}_N)^\perp$. Par l'équation (6.4), on a

$$\text{Ker}(\mathcal{I}_N)^\perp = \text{Vect} \{K(\cdot, t_{N,0}), \dots, K(\cdot, t_{N,N})\}.$$

Ainsi, on peut écrire :

$$\rho_N(h_N) = \sum_{j=0}^N \alpha_j K(\cdot, t_{N,j}). \quad (6.7)$$

Comme $\rho_N(h_N)(t_{N,i}) = h_N(t_{N,i})$ pour $i = 0, \dots, N$, on a $\alpha := (\alpha_0, \dots, \alpha_N)^\top = (\Gamma^N)^{-1} c_{h_N}$, ce qui nous conduit à l'équation (6.5). En utilisant l'équation (6.7), on obtient

$$\|\rho_N(h_N)\|_H^2 = (\rho_N(h_N), \rho_N(h_N))_H = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \alpha_i \alpha_j (K(\cdot, t_{N,i}) K(\cdot, t_{N,j}))_H.$$

6.3. OPTIMISATION DISCRÉTISÉE

De $(K(\cdot, t_{N,i}), K(\cdot, t_{N,j}))_H = K(t_{N,i}, t_{N,j})$, on en déduit

$$\|\rho_N(h_N)\|_H^2 = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \alpha_j \alpha_i K(t_{N,i}, t_{N,j}) = \alpha^\top \Gamma^N \alpha,$$

avec $\alpha = (\Gamma^N)^{-1} c_{h_N}$, ce qui termine la preuve de la proposition. \square

Avec la Proposition 5, on est en mesure de construire le produit scalaire dans H_N tel que $\|\rho_N(h_N)\|_H = \|h_N\|_{H_N}$.

Théorème 8. *Soit le produit scalaire suivant sur H_N :*

$$(f, g)_{H_N} := c_f^\top (\Gamma^N)^{-1} c_g, \quad (6.8)$$

avec $c_f := (f(t_{N,0}), \dots, f(t_{N,N}))^\top$ et $c_g := (g(t_{N,0}), \dots, g(t_{N,N}))^\top$. Alors, l'espace H_N est une RKHS de dimension finie et de noyau reproduisant K_N donné par

$$\forall x, x' \in [0, 1], \quad K_N(x, x') = \sum_{i,j=0}^N K(t_{N,i}, t_{N,j}) \phi_{N,i}(x) \phi_{N,j}(x').$$

Preuve. Il est clair que H_N est un espace de Hilbert de dimension finie. Soit x dans X . Considérons la fonction K_N définie dans le Théorème 8 :

$$K_N(\cdot, x) = \sum_{j=0}^N \lambda_{j,x} \phi_{N,j} \in H_N, \quad (6.9)$$

où $\lambda_{j,x} = \sum_{k=0}^N K(t_{N,j}, t_{N,k}) \phi_{N,k}(x) = (\Gamma^N \phi(x))_j$, avec $\phi(x) := (\phi_{N,0}(x), \dots, \phi_{N,N}(x))^\top$.

Soit $h := \sum_{i=0}^N \alpha_i \phi_{N,i} \in H_N$. En utilisant l'équation (6.8), on obtient

$$(h, K_N(\cdot, x))_{H_N} = \alpha^\top (\Gamma^N)^{-1} (\Gamma^N \phi(x)) = \alpha^\top \phi(x) = h(x),$$

ce qui est la propriété de reproduction. \square

Proposition 6. *L'opérateur ρ_N est stable. Mieux, ρ_N est une isométrie de H_N dans H , i.e. :*

$$\forall h_N \in H_N, \quad \|\rho_N(h_N)\|_H^2 = \|h_N\|_{H_N}^2.$$

De plus,

$$\forall x \in X, \quad \rho_N(K_N(\cdot, x)) = \sum_{j=0}^N \phi_{N,j}(x) K(\cdot, t_{N,j}). \quad (6.10)$$

Preuve. Soit h_N un élément de H_N , alors $h_N = c_{h_N}^\top \phi(x)$. Par définition du produit scalaire dans H_N , on a

$$\|h_N\|_{H_N}^2 = (h_N, h_N)_{H_N} = c_{h_N}^\top (\Gamma^N)^{-1} c_{h_N}.$$

En utilisant l'équation (6.6), on obtient $\|\rho_N(h_N)\|_H^2 = \|h_N\|_{H_N}^2$. Comme $c_{K_N(\cdot, x)} = \Gamma^N \phi(x)$ (voir l'équation (6.9)), on obtient la relation (6.10) par l'équation (6.5). □

Proposition 7. Pour tout f dans E ,

$$\|\pi_N(f)\|_{H_N}^2 = c_f^\top (\Gamma^N)^{-1} c_f,$$

avec $c_f = (f(t_{N,0}), \dots, f(t_{N,N}))^\top$. De plus, π_N est stable, i.e.

$$\forall h \in H, \quad \|\pi_N(h)\|_{H_N} \leq \|h\|_H.$$

Preuve. L'égalité résulte de la définition de la norme $\|\cdot\|_{H_N}$ (cf. Théorème 8). Pour établir l'inégalité, on considère la décomposition orthogonale dans H : $H = H_0^N \oplus H_1^N$ avec

$$\begin{aligned} H_0^N &= \{h \in H : h(t_{N,j}) = 0, j = 0, \dots, N\}, \\ H_1^N &= \text{Vect} \{K(\cdot, t_{N,j}), j = 0, \dots, N\}. \end{aligned}$$

Pour tout $h \in H$, il existe $h_0 \in H_0^N$ et $h_1 \in H_1^N$ tels que $h = h_0 + h_1$. On a (cf. théorème de Pythagore) :

$$\|h_1\|_H^2 \leq \|h\|_H^2.$$

Comme $h_1 \in H_1^N$, on écrit : $h_1(\cdot) = \sum_{j=0}^N \alpha_j K(\cdot, t_{N,j})$. Par la propriété de reproduction $(K(\cdot, t_{N,j}), K(\cdot, t_{N,i}))_H = K(t_{N,i}, t_{N,j})$, on obtient

$$\|h_1\|_H^2 = (h_1, h_1)_H = \sum_{i,j=0}^N \alpha_i \alpha_j K(t_{N,i}, t_{N,j}) = \alpha^\top \Gamma^N \alpha.$$

De $h_1(t_{N,i}) = \sum_{j=0}^N \alpha_j K(t_{N,i}, t_{N,j})$ pour tout $i = 0, \dots, N$, on déduit $\alpha = (\Gamma^N)^{-1} c_{h_1}$ et

$$\|h_1\|_H^2 = c_{h_1}^\top (\Gamma^N)^{-1} \Gamma^N (\Gamma^N)^{-1} c_{h_1} = c_{h_1}^\top (\Gamma^N)^{-1} c_{h_1}.$$

Or, $h_0 \in H_0^N$, $c_{h_1} = c_h$, d'où $\|h_1\|_H^2 = c_h^\top (\Gamma^N)^{-1} c_h = \|\pi_N(h)\|_{H_N}^2$, ce qui termine la preuve de la proposition. □

Proposition 8. Soit Q_N la projection orthogonale de H sur $(H_0^N)^\perp = H_1^N$. Pour tout $h \in H$, on a

$$\rho_N \circ \pi_N(h) = Q_N(h).$$

De plus, (H_N, π_N, ρ_N) est consistant, i.e.

$$\rho_N(\pi_N(h)) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} h \quad \text{dans } H.$$

Preuve. Avec la preuve de la Proposition 7, on a obtenu $Q_N(h) = \mathbf{k}(\cdot)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_h$. Par ailleurs, on sait que $\rho_N(\pi_N(h)) = \mathbf{k}(\cdot) (\Gamma^N)^{-1} c_h$ par la Proposition 5. Donc, $\rho_N \circ \pi_N$ est bien la projection orthogonale de H dans H_1^N . Pour compléter la preuve de la proposition, il suffit de montrer que le sous-espace $\bigcup_N H_1^N$ est dense dans H . Soit h un élément dans $(\bigcup_N H_1^N)^\perp$. Par la propriété de reproduction, on a $h(t_{N,i}) = 0$, pour tout $N \geq 1$ et $i = 0, \dots, N$. Par continuité de la fonction h , on a $h = 0$ et donc $(\bigcup_N H_1^N)^\perp = \{0\}$. \square

6.3.2 Existence et unicité de la solution du problème (P_N)

On rappelle les deux problèmes (P) et (P_N) qui sont définis respectivement par :

$$\min\{\|h\|_H^2, h \in H \cap C \cap I\} \quad \text{et} \quad \min\{\|h\|_{H_N}^2, h \in H_N \cap C \cap I\}.$$

Hypothèses.

$$\begin{aligned} \text{(H1)} \quad & \widehat{H \cap C} \cap I \neq \emptyset \\ \text{(H2)} \quad & \forall N, \pi_N(C) \subset C \end{aligned}$$

Par la première hypothèse, l'espace convexe fermé $H \cap C \cap I$ est non vide, et le problème (P) admet une solution unique, notée \hat{h} .

Maintenant, si $g \in \widehat{H \cap C} \cap I \neq \emptyset$, on peut construire une suite $(g_N)_{N \geq 1}$ dans H telle que $\lim_{N \rightarrow +\infty} g_N = g$ dans H et $\pi_N(g_N) \in I$. En utilisant l'hypothèse (H2), ce résultat prouve que $\pi_N(g_N)$ appartient à $H_N \cap C \cap I$ pour N assez grand. Par suite, le problème (P_N) admet à son tour une solution unique, notée \hat{h}_N .

On construit maintenant la suite $(g_N)_{N \geq 1}$ associée à $g \in \widehat{H \cap C} \cap I$. Si $x^{(k)}$ est un point d'observation, on définit $[a_{N,k}, b_{N,k}]$ le plus petit intervalle de Δ_N qui contienne $x^{(k)}$: $x^{(k)} = \lambda_{N,k} a_{N,k} + (1 - \lambda_{N,k}) b_{N,k}$, où $\lambda_{N,k} \in [0, 1]$. Soit

$$F_N := \{h \in H : \lambda_{N,k} h(a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k}) h(b_{N,k}) = y_k, k = 1, \dots, n\},$$

et le problème d'optimisation :

$$\min_{h \in F_N} \|h - g\|_H^2. \quad (R_N)$$

Par le théorème classique de projection, le problème (R_N) admet une solution unique notée g_N .

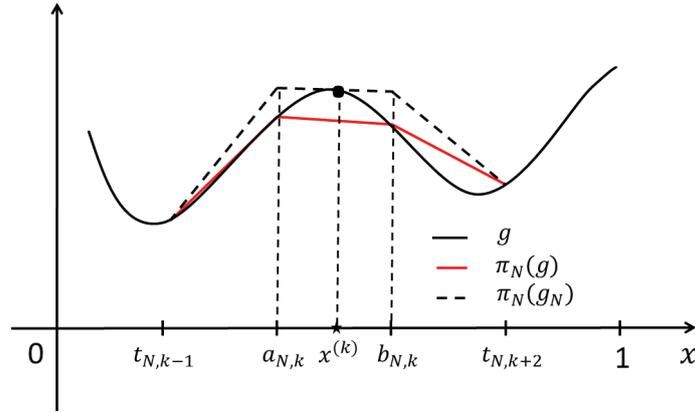


FIGURE 33 – La fonction $\pi_N(g_N)$ dans la voisinage du point d'observation $x^{(k)}$.

La Figure 33 montre la projection $\pi_N(g_N)$ (courbe en tiret noir) de la solution du problème (R_N) . Remarquer que la fonction $\pi_N(g)$ (courbe en rouge) ne respecte pas la condition d'interpolation, au point $x^{(k)}$.

Lemme 2. Si $g \in H \cap I$, alors $g_N \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} g$ dans H .

Preuve. On définit les deux espaces G_0^N et G_1^N respectivement par :

$$\begin{aligned} G_0^N &:= \{h \in H : \lambda_{N,k}h(a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k})h(b_{N,k}) = 0, k = 1, \dots, n\}, \\ G_1^N &:= \text{Vect} \{\lambda_{N,k}K(\cdot, a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k})K(\cdot, b_{N,k}), k = 1, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Soit un élément arbitraire f dans F_N ($\neq \emptyset$), on a $F_N = f + G_0^N$ et $g_N = f + P_{G_0^N}(g - f)$, où $P_{G_0^N}$ est le projecteur orthogonal sur G_0^N . Ainsi, $g - g_N = g - f - P_{G_0^N}(g - f) \in (G_0^N)^\perp = G_1^N$, et il existe $\beta^N = (\beta_1^N, \dots, \beta_n^N)^\top$ dans \mathbb{R}^n tel que

$$g - g_N = \sum_{k=1}^n \beta_k^N \epsilon_k^N, \quad (6.11)$$

6.3. OPTIMISATION DISCRÉTISÉE

où $\epsilon_k^N := \lambda_{N,k}K(\cdot, a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k})K(\cdot, b_{N,k})$. Le vecteur β^N est solution du système linéaire suivant

$$A^N \beta^N = \mathbf{b}^N, \quad (6.12)$$

où $A_{k,l}^N := (\epsilon_k^N, \epsilon_l^N)_H$ et où $\mathbf{b}^N := (b_1^N, \dots, b_n^N)^\top$ avec $b_k^N := \lambda_{N,k}g(a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k})g(b_{N,k}) - y_k$. Maintenant, chaque produit scalaire

$$(\epsilon_k^N, \epsilon_l^N)_H = (\lambda_{N,k}K(\cdot, a_{N,k}) + (1 - \lambda_{N,k})K(\cdot, b_{N,k}), \lambda_{N,l}K(\cdot, a_{N,l}) + (1 - \lambda_{N,l})K(\cdot, b_{N,l}))_H$$

converge vers $(K(\cdot, x^{(k)}), K(\cdot, x^{(l)}))_H = K(x^{(k)}, x^{(l)})$ par continuité de $K(\cdot, \cdot)$. D'autre part, le vecteur à droite de l'équation (6.12) converge vers zéro par continuité de la fonction g . Comme la matrice $((K(\cdot, x^{(k)}), K(\cdot, x^{(l)}))_H)_{1 \leq k, l \leq n}$ est inversible, le Lemme 2 est une conséquence des équations (6.11) et (6.12). □

Théorème 9. *Sous les deux hypothèses (H1) et (H2), le problème d'optimisation discrétisé (P_N) admet une solution unique \hat{h}_N (pour N suffisamment grand).*

Preuve. Pour N assez grand, $H_N \cap C \cap I$ est un ensemble convexe non vide de H_N . □

6.3.3 Analyse de la convergence

On commence par quelques lemmes techniques utilisés pour prouver la convergence de la suite $(\hat{h}_N)_N$ vers \hat{h} dans l'espace $E = \mathcal{C}^0(X)$.

Lemme 3. *Soit $h_1 \in H \cap C \cap I$ et $h_0 \in \widehat{H \cap C} \cap I$. On pose $h_t := (1 - t)h_0 + th_1 \in H$, pour tout $t \in [0, 1]$. Alors*

1. h_t converge vers h_1 lorsque t tend vers 1.

2. $\forall t < 1, h_t \in \widehat{H \cap C} \cap I$.

Preuve. La première propriété est vérifiée par construction. Ensuite, comme $h_0 \in \widehat{H \cap C}$, il existe $r > 0$ tel que la boule ouverte $B(h_0, r)$ soit contenue dans $H \cap C$. Pour tout $t \in [0, 1]$, on définit ϕ_t comme suit :

$$\phi_t : h \in H \longrightarrow (1 - t)h + th_1.$$

On a $\phi_t(H \cap C) \subset H \cap C$ et $\phi_t(B(h_0, r)) = B(h_t, (1 - t)r) \subset H \cap C$. Donc $h_t \in \widehat{H \cap C}$. Clairement, $h_t \in I$ (car $h_0 \in I$ et $h_1 \in I$), ce qui termine la preuve du lemme. □

Lemme 4. Soit $\epsilon > 0$ arbitrairement petit. Il existe $g \in \widehat{H \cap C} \cap I$ tel que $\|g\|_H \leq \|\hat{h}\|_H + \epsilon$, où \hat{h} est la solution du problème (P).

Preuve. Par l'hypothèse (H1), il existe $g \in \widehat{H \cap C} \cap I$. En utilisant le Lemme 3 avec $h_0 = g$ et $h_1 = \hat{h} \in H \cap C \cap I$, on peut choisir t tel que $h_t \in \widehat{H \cap C} \cap I$ et $\|h_t - \hat{h}\|_H \leq \epsilon$. A fortiori, $\|h_t\|_H \leq \|\hat{h}\|_H + \epsilon$ et $g = h_t$ convient. □

Lemme 5. Soit $\epsilon > 0$. Pour N assez grand, on a

$$\|\hat{h}_N\|_{H_N} \leq \|\hat{h}\|_H + 2\epsilon.$$

Preuve. Soit $g \in \widehat{H \cap C} \cap I$ telle que $\|g\|_H \leq \|\hat{h}\|_H + \epsilon$ (voir Lemme 4). Soit g_N la solution du problème (R_N) associée à g . Par le Lemme 2, pour N assez grand, on a :

$$\|g_N\|_H \leq \|g\|_H + \epsilon \leq \|\hat{h}\|_H + 2\epsilon.$$

Comme $\pi_N(g_N) \in H_N \cap C \cap I$ et π_N est stable, on a $\|\hat{h}_N\|_{H_N} \leq \|\pi_N(g_N)\|_{H_N} \leq \|g_N\|_H$, ce qui complète la preuve du lemme. □

Lemme 6. Pour tout x dans X , $\rho_N(K_N(\cdot, x)) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} K(\cdot, x)$ dans H . De plus,

$$\sup_{x \in X} \|\rho_N(K_N(\cdot, x)) - K(\cdot, x)\|_H \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0.$$

Preuve. Par la Proposition 6, on a

$$\begin{aligned} \|\rho_N(K_N(\cdot, x)) - K(\cdot, x)\|_H^2 &= \|\rho_N(K_N(\cdot, x))\|_H^2 + \|K(\cdot, x)\|_H^2 - 2(\rho_N(K_N(\cdot, x)), K(\cdot, x))_H \\ &= \|K_N(\cdot, x)\|_{H_N}^2 + \|K(\cdot, x)\|_H^2 - 2 \sum_{j=0}^N \phi_{N,j}(x) K(x, t_{N,j}) \\ &= K_N(x, x) + K(x, x) - 2 \sum_{j=0}^N \phi_{N,j}(x) K(x, t_{N,j}). \end{aligned}$$

Par continuité uniforme de $K(\cdot, \cdot)$ sur le compact $X \times X$, on en déduit que les fonctions $K_N(x, x) = \sum_{i,j=0}^N K(t_{N,i}, t_{N,j}) \phi_{N,i}(x) \phi_{N,j}(x)$ et $\sum_{j=0}^N \phi_{N,j}(x) K(x, t_{N,j})$ convergent uniformément vers la fonction $K(x, x)$, ce qui permet de conclure. □

Proposition 9. Soient \hat{h}_N et \hat{h} les solutions des problèmes (P_N) et (P) respectivement. Alors

6.3. OPTIMISATION DISCRÉTISÉE

1. $\|\hat{h}_N\|_{H_N}^2 \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \|\hat{h}\|_H^2.$
2. $\rho_N(\hat{h}_N) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \hat{h}$ dans H .

Preuve. Par le Lemme 5, on a

$$\limsup_{N \rightarrow +\infty} \|\hat{h}_N\|_{H_N} \leq \|\hat{h}\|_H.$$

De plus, de la Proposition 6, on déduit que $\|\rho_N(\hat{h}_N)\|_H = \|\hat{h}_N\|_{H_N}$, donc $\limsup_{N \rightarrow +\infty} \|\rho_N(\hat{h}_N)\|_H \leq \|\hat{h}\|_H < +\infty$. Par compacité faible dans l'espace de Hilbert H ,

il existe une sous-suite $(\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}))_{k \in \mathbb{N}}$ faiblement convergente :

$$\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} l \quad \text{dans } H. \quad (6.13)$$

Montrons que la limite l appartient à $C \cap I$.

- Soit $i \in \{1, \dots, n\}$ et $k \geq 0$. On a :

$$y_i = \hat{h}_{N_k}(x^{(i)}) = \left(\hat{h}_{N_k}, K_{N_k}(\cdot, x^{(i)}) \right)_{H_{N_k}} = \left(\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}), \rho_{N_k}(K_{N_k}(\cdot, x^{(i)})) \right)_H.$$

Comme $\rho_{N_k}(K_{N_k}(\cdot, x^{(i)})) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} K(\cdot, x^{(i)})$ fortement dans H (voir Lemme 6), on a avec (6.13) :

$$\left(\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}), \rho_{N_k}(K_{N_k}(\cdot, x^{(i)})) \right)_H \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} (l, K(\cdot, x^{(i)}))_H = l(x^{(i)}),$$

ce qui implique $y_i = l(x^{(i)})$. Par suite $l \in I$.

- Fixons $N \geq 1$. On a $\pi_N(\hat{h}_{N_k}) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} \pi_N(l)$ dans l'espace de dimension finie H_N car $\hat{h}_{N_k}(t_{N,j}) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} l(t_{N,j})$ par l'argument précédent qui montre que $l \in I$. Comme $\hat{h}_{N_k} \in C$, $\pi_N(C) \subset C$ et $H_N \cap C$ est fermé dans H_N , on a $\pi_N(l) \in C$. Comme $\pi_N(l)$ converge vers l dans E (voir la Proposition 4) et C est fermé pour la topologie de E , $l \in C$.

De $l \in H \cap C \cap I$, on déduit que

$$\|\hat{h}\|_H^2 \leq \|l\|_H^2.$$

Comme $\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} l$ dans H , on a $\|l\|_H \leq \liminf_{k \rightarrow +\infty} \|\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k})\|_H$. Donc,

$$\limsup_{k \rightarrow +\infty} \|\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k})\|_H \leq \|\hat{h}\|_H \leq \|l\|_H \leq \liminf_{k \rightarrow +\infty} \|\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k})\|_H. \quad (6.14)$$

Par suite, $\|l\|_H = \|\hat{h}\|_H$ et $l = \hat{h}$ par l'unicité de la solution du problème (P). Des inégalités (6.14), on déduit que $\|\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k})\|_H \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} \|\hat{h}\|_H$. Mais la convergence faible (voir (6.13)) et la convergence en norme entraînent la convergence forte (dans un espace de Hilbert). Donc, la sous-suite $(\rho_{N_k}(\hat{h}_{N_k}))_k$ converge fortement vers \hat{h} ainsi que la suite $(\rho_N(\hat{h}_N))_N$. \square

La première partie de la Proposition 9 est une étape essentielle pour l'analyse de la convergence de la suite $(\hat{h}_N)_N$. Le théorème suivant résume les résultats principaux de ce chapitre.

Théorème 10. *Sous les deux hypothèses (H1) et (H2), le problème d'optimisation finidimensionnel (P_N) admet une solution unique $\hat{h}_N \in H_N \subset E = \mathcal{C}^0(X)$ (pour N assez grand). Soit \hat{h} la solution unique dans l'espace RKHS $H \subset E$ du problème d'interpolation optimale sous contraintes (P). Alors,*

$$\hat{h}_N \xrightarrow[N \rightarrow +\infty]{} \hat{h} \quad \text{dans } E,$$

et

$$\begin{aligned} \|\hat{h}_N\|_{H_N}^2 &\xrightarrow[N \rightarrow +\infty]{} \|\hat{h}\|_H^2, \\ \rho_N(\hat{h}_N) &\xrightarrow[N \rightarrow +\infty]{} \hat{h} \quad \text{dans } H. \end{aligned}$$

Preuve. Soient \hat{h} et \hat{h}_N les solutions des deux problèmes (P) et (P_N) respectivement. Alors

$$\begin{aligned} \hat{h}_N(x) - \hat{h}(x) &= \left(\hat{h}_N, K_N(\cdot, x) \right)_{H_N} - \left(\hat{h}, K(\cdot, x) \right)_H \\ &= \left(\rho_N(\hat{h}_N), \rho_N(K_N(\cdot, x)) \right)_H - \left(\hat{h}, K(\cdot, x) \right)_H \\ &= \left(\rho_N(\hat{h}_N), \rho_N(K_N(\cdot, x)) - K(\cdot, x) \right)_H + \left(\rho_N(\hat{h}_N) - \hat{h}, K(\cdot, x) \right)_H. \end{aligned}$$

De là,

$$\begin{aligned} \sup_{x \in X} |\hat{h}_N(x) - \hat{h}(x)| &\leq \|\rho_N(\hat{h}_N)\|_H \times \sup_{x \in X} \|\rho_N(K_N(\cdot, x)) - K(\cdot, x)\|_H \\ &\quad + \|\rho_N(\hat{h}_N) - \hat{h}\|_H \times \sup_{x \in X} \|K(\cdot, x)\|_H. \end{aligned}$$

6.3. OPTIMISATION DISCRÉTISÉE

Or $\sup_{x \in X} \|K(\cdot, x)\|_H = \sup_{x \in X} \sqrt{K(x, x)} < +\infty$ (K est une fonction continue sur X^2). Il suffit maintenant d'utiliser la Proposition 9 et le Lemme 6 pour conclure. \square

6.3.4 Implémentation du problème (P_N)

Le but de cette section est de montrer que le problème d'optimisation fini-dimensionnel (P_N) est équivalent à un programme d'optimisation convexe. Pour cela, on définit l'application ψ de \mathbb{R}^{N+1} dans H_N suivante :

$$\psi : \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \longrightarrow \psi(\alpha) = \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j}(\cdot) \in H_N,$$

où $\phi_{N,j}$, $j = 0, \dots, N$ sont définies par (6.3). Sur \mathbb{R}^{N+1} , on considère le produit scalaire :

$$(\alpha, \beta)_{\mathbb{R}^{N+1}} := \alpha^\top (\Gamma^N)^{-1} \beta.$$

Ainsi, l'application ψ est une isométrie surjective : si $f = \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j} \in H_N$,

$$\|f\|_{H_N}^2 = \alpha^\top (\Gamma^N)^{-1} \alpha = \|\alpha\|_{\mathbb{R}^{N+1}}^2.$$

Par l'isomorphisme ψ , on définit le sous-espace convexe fermé de \mathbb{R}^{N+1} , $\tilde{C} := \psi^{-1}(C)$ et $\tilde{I} := \psi^{-1}(I)$ le sous-espace affine de \mathbb{R}^{N+1} :

$$\tilde{I} = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \text{ tel que } \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j}(x^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n \right\}.$$

On considère maintenant le problème d'optimisation convexe dans \mathbb{R}^{N+1} :

$$\arg \min_{\substack{\alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \\ \alpha \in \tilde{I} \cap \tilde{C}}} \alpha^\top (\Gamma^N)^{-1} \alpha, \quad (\tilde{P}_N)$$

où \tilde{I} et \tilde{C} représentent respectivement les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité dans \mathbb{R}^{N+1} . Ce problème (\tilde{P}_N) est un problème classique d'optimisation convexe avec un critère quadratique, voir e.g. [Boyd and Vandenberghe, 2004] et [Goldfarb and Idnani, 1983] pour la résolution.

Proposition 10. *La solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) est de la forme :*

$$\hat{h}_N = \sum_{j=0}^N (\alpha_{opt})_j \phi_{N,j},$$

où $\alpha_{opt} \in \mathbb{R}^{N+1}$ est la solution unique du programme d'optimisation convexe (\tilde{P}_N).

6.4 Illustration numérique

6.4.1 Contraintes de borne

On se place dans l'espace de Banach $E = \mathcal{C}^0([0, 1])$ des fonctions continues sur $[0, 1]$. Soit H le RKHS de noyau reproduisant $K(x, y) = \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{2\theta^2}\right)$, où θ est un paramètre de portée. Dans cette sous-section, l'ensemble des contraintes inégalité C est de la forme

$$C = \{f \in E : -\infty \leq a \leq f(x) \leq b \leq +\infty, x \in [0, 1]\},$$

où a et b sont connues de manière explicite. On vérifie que c'est bien un ensemble convexe fermé de E .

On rappelle la caractérisation des fonctions à la fois dans H_N et C (cf. Chapitre 3).

Proposition 11. *Soit $h_N \in H_N$. Alors,*

$$h_N := \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j} \in C \text{ si et seulement si les coefficients } \alpha_{N,j} \in [a, b], \quad j = 0, \dots, N.$$

On déduit de cette proposition que $\pi_N(C) \subset C$ pour tout $N \geq 1$, ce qui est l'hypothèse (H2). Soit \hat{h}_N la solution du problème d'optimisation fini-dimensionnel (P_N). Par les deux Propositions 10 et 11, \hat{h}_N peut s'écrire sous la forme :

$$x \in [0, 1], \quad \hat{h}_N(x) = \sum_{j=0}^N (\alpha_{opt})_j \phi_{N,j}(x),$$

où $\alpha_{opt} \in \mathbb{R}^{N+1}$ est la solution du problème quadratique suivant :

$$\arg \min_{\substack{\alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \\ \alpha \in \tilde{I} \cap \tilde{C}}} \|\alpha\|_{\mathbb{R}^{N+1}}^2,$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{I} &= \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} : \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j}(x^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n \right\}, \\ \tilde{C} &= \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} : a \leq \alpha_{N,j} \leq b, \quad j = 0, \dots, N \right\}. \end{aligned}$$

Pour satisfaire l'hypothèse (H1), on suppose que

$$a < y_i < b, \quad i = 1, \dots, n.$$

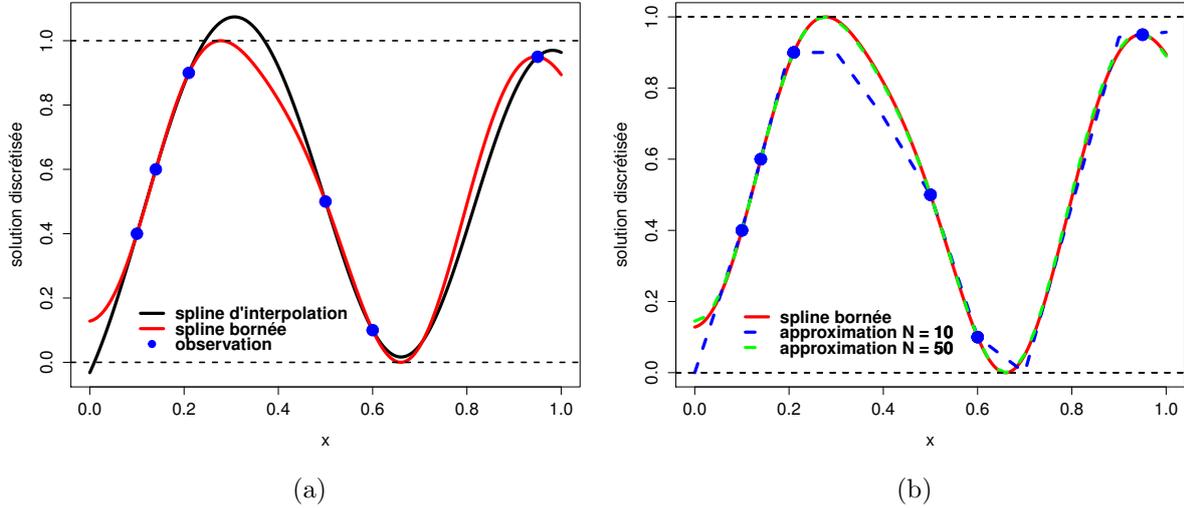


FIGURE 34 – Fonction d’interpolation sans et avec contraintes de borne (Figure 34a). Convergence de la solution discrétisée \hat{h}_N , $N = 10$ et $N = 50$ (Figure 34b).

Dans l’exemple numérique (voir Figure 34), on choisit $a = 0$, $b = 1$ et $n = 6$ conditions d’interpolation (i.e. points d’observation). La valeur du paramètre θ est fixée à 0.18.

Sur la Figure 34a la solution du problème (P) sans tenir compte des contraintes de borne (courbe noire) ainsi que la solution du problème d’optimisation discrétisé (P_N) \hat{h}_N pour $N = 500$ (courbe en rouge) sont représentées. La fonction \hat{h}_N respecte les conditions d’interpolation et les contraintes de borne. La Figure 34b montre la convergence de la solution proposée. Les deux courbes en bleu et vert représentent respectivement la fonction \hat{h}_N pour $N = 10$ et $N = 50$.

6.4.2 Contraintes de monotonie en dimension 1

E et H sont les mêmes espaces définis dans la Section 6.4.1. L’espace convexe C est l’espace des fonctions monotones (croissantes) suivant :

$$C := \{f \in \mathcal{C}^0([0, 1]) : f(x) \leq f(x') \text{ si } x \leq x'\}.$$

En utilisant les mêmes notations, on rappelle le résultat suivant (cf. Chapitre 2, Remarque 1) :

Proposition 12. Soit $h_N \in H_N$. Alors, $h_N(x) := \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j}(x)$ est croissante si et seulement si la suite $(\alpha_{N,j})_{j=0, \dots, N}$ est croissante (i.e. $\alpha_{N,j-1} \leq \alpha_{N,j}$, $j = 1, \dots, N$).

De cette proposition, on vérifie à nouveau $\pi_N(C) \subset C$ pour tout N . De plus, les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité dans \mathbb{R}^{N+1} s'écrivent :

$$\tilde{I} = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} : \sum_{j=0}^N \alpha_{N,j} \phi_{N,j}(x^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n \right\}, \quad (6.15)$$

$$\tilde{C} = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} : \alpha_{N,j-1} \leq \alpha_{N,j}, \quad j = 0, \dots, N \right\}. \quad (6.16)$$

Pour satisfaire l'hypothèse (H1), on suppose

$$y_{i-1} < y_i, \quad i = 2, \dots, n.$$

Par la Proposition 10, la solution du problème (P_N) est égale à :

$$x \in [0, 1], \quad \hat{h}_N(x) = \sum_{j=0}^N (\alpha_{opt})_j \phi_{N,j}(x),$$

où $\alpha_{opt} \in \mathbb{R}^{N+1}$ est la solution d'un problème quadratique (\tilde{P}_N), \tilde{I} et \tilde{C} étant définis par les équations (6.15) et (6.16) respectivement. La Figure 35 montre la convergence de l'algorithme proposé. Sur la Figure 35a, la courbe noire représente la solution du problème (P) sans tenir compte des contraintes de monotonie et la courbe rouge représente la solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) pour $N = 500$. Remarquons que seulement la dernière fonction respecte les contraintes de monotonie. Sur la Figure 35b, la convergence des différentes approximations est illustrée. La courbe rouge représente la fonction \hat{h}_N pour $N = 500$ et la courbe bleue (respectivement la courbe verte) correspond à la fonction \hat{h}_N pour $N = 5$ (respectivement $N = 20$).

6.4.3 Cas d'un nombre fini de contraintes inégalité

Les splines d'interpolation sous contraintes sont définies comme solutions du problème initial (P) où la norme (ou semi-norme) est définie par un opérateur différentiel. Dans le cadre des splines, le problème d'interpolation sous un nombre fini de contraintes linéaires de type inégalité a été étudié par [Dubrule and Kostov, 1986], [Duchon, 1976] dans \mathbb{R}^2 et [Laurent, 1972] dans \mathbb{R} . On propose de vérifier la convergence de l'algorithme proposé en utilisant la solution analytique. Pour cela, on rappelle les résultats principaux obtenus dans [Dubrule and Kostov, 1986]. Le nombre fini de contraintes de type inégalité sont nommées respectivement contraintes inférieures et contraintes supérieures et sont de la forme :

$$f(x^{(i)}) \geq y_i, \quad i = n + 1, \dots, n + p_1, \quad (6.17)$$

$$f(x^{(i)}) \leq y_i, \quad i = n + p_1 + 1, \dots, n + p_1 + p_2. \quad (6.18)$$

6.4. ILLUSTRATION NUMÉRIQUE

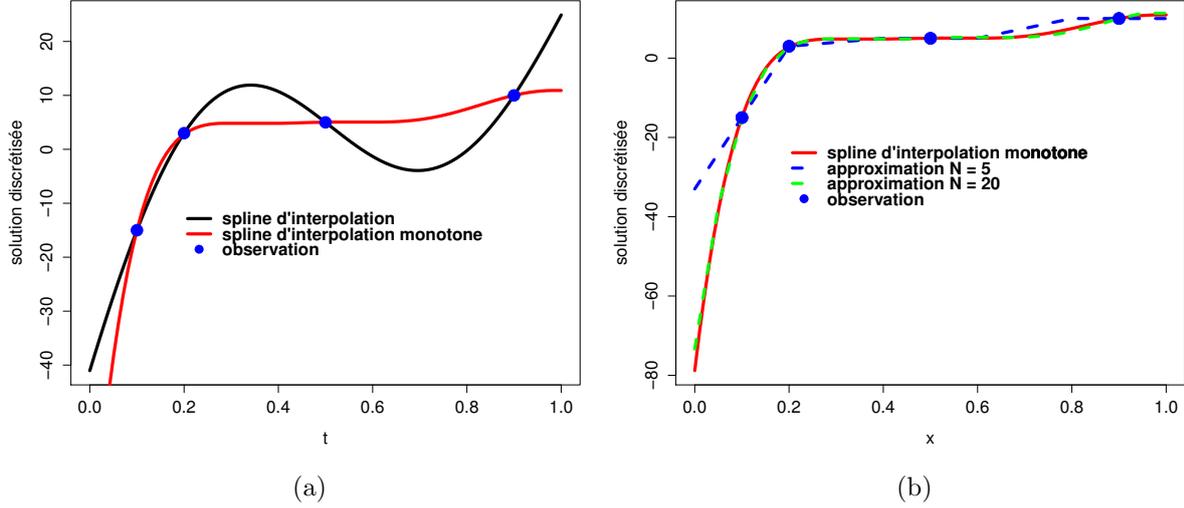


FIGURE 35 – Fonction d'interpolation sans et avec contraintes de monotonie (Figure 35a). Convergence de la solution discrétisée \hat{h}_N pour $N = 5$ et $N = 20$ (Figure 35b).

en plus des n conditions d'interpolation $f(x^{(i)}) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. Dans ce cas, on a p contraintes de type inégalité avec $p = p_1 + p_2$. La forme analytique de la spline d'interpolation sous contraintes a été calculée

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^{n+p} b^i K(x, x^{(i)}), \quad (6.19)$$

où la fonction K est le noyau reproduisant associé au RKHS H . Les $(n + p)$ coefficients $b = (b^1, \dots, b^{n+p})^\top$ forment la solution du problème d'optimisation quadratique suivant :

$$\arg \min_b \sum_{i=1}^{n+p} \sum_{j=1}^{n+p} b^i b^j K(x^{(i)}, x^{(j)}),$$

sous les n contraintes égalité $f(x^{(i)}) = y_i$, ($i = 1, \dots, n$) et les p contraintes inégalité (6.17) et (6.18).

L'espace convexe C est ici le sous-espace des fonctions vérifiant les contraintes inégalité (6.17) et (6.18). Dans ce cas, la solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) est égale à :

$$\hat{h}_N(x) = \sum_{j=0}^N (\alpha_{opt})_j \phi_{N,j}(x) \quad (6.20)$$

où les $(N + 1)$ coefficients $((\alpha_{opt})_0, \dots, (\alpha_{opt})_N)$ sont donnés par le programme d'optimisation quadratique suivant :

$$\arg \min_{\substack{\alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \\ \alpha \in \tilde{I} \cap \tilde{C}}} \|\alpha\|_{\mathbb{R}^{N+1}}^2, \quad \text{où}$$

$$\begin{aligned} \tilde{I} &= \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \text{ tel que } \hat{h}_N(x^{(i)}) = y_i, \quad i = 1, \dots, n \right\}, \\ \tilde{C} &= \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{N+1} \text{ tel que } \hat{h}_N \text{ vérifie (6.17) et (6.18)} \right\}. \end{aligned}$$

Sur la Figure 36, le noyau reproduisant utilisé est le noyau de covariance Matérn 3/2 :

$$K_{m_{\frac{3}{2}}}(x, y) = \left(1 + \frac{\sqrt{3}|x - y|}{\theta} \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{3}|x - y|}{\theta} \right),$$

où θ est le paramètre de portée égal à 0.3 dans l'exemple numérique. On choisit $n = 6$ conditions d'interpolation et $p = 3$ contraintes inégalité ($p_1 = 2$ et $p_2 = 1$). La courbe noire représente la fonction spline d'interpolation sous contraintes définie par (6.19) et en utilisant l'algorithme de Dubrule. Sur les deux Figures 36a et 36b, on illustre respectivement la fonction \hat{h}_N définie par (6.20) pour $N = 10$ et $N = 40$. La fonction \hat{h}_N respecte les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité et coïncide avec la spline d'interpolation sous contraintes σ lorsque N est grand.

Sur la Figure 37, le noyau gaussien est utilisé avec un paramètre de portée θ qui est fixé à 0.3. La courbe noire représente la spline d'interpolation sous contraintes définie par (6.19) et en utilisant l'algorithme de Dubrule. La courbe en tirets rouges correspond à la fonction \hat{h}_N définie comme la solution du problème (P_N) pour $N = 10$ (Figure 37a) et $N = 40$ (Figure 37b).

6.4.4 Contraintes de monotonie en dimension $d \geq 2$

On commence par le cas où $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$. La fonction inconnue (ou fonction réelle) f est supposée continue et monotone (croissante) par rapport aux deux variables sur le carré unité $X = [0, 1] \times [0, 1]$:

$$x_1 \leq x'_1 \quad \text{et} \quad x_2 \leq x'_2 \quad \Rightarrow \quad f(x_1, x_2) \leq f(x'_1, x'_2).$$

On construit les fonctions de base de sorte que les contraintes de monotonie soient *équivalentes* à des contraintes linéaires sur les coefficients. Premièrement, on discrétise l'intervalle $[0, 1]^2$, par exemple uniformément en $(N + 1)^2$ nœuds, voir e.g. la Figure 38 pour $N = 7$. Alors, la fonction de base au nœud $(t_{N,i}, t_{N,j})$ est de la forme :

$$\phi_{i,j}(\mathbf{x}) := \phi_{N,i}(x_1)\phi_{N,j}(x_2),$$

6.4. ILLUSTRATION NUMÉRIQUE

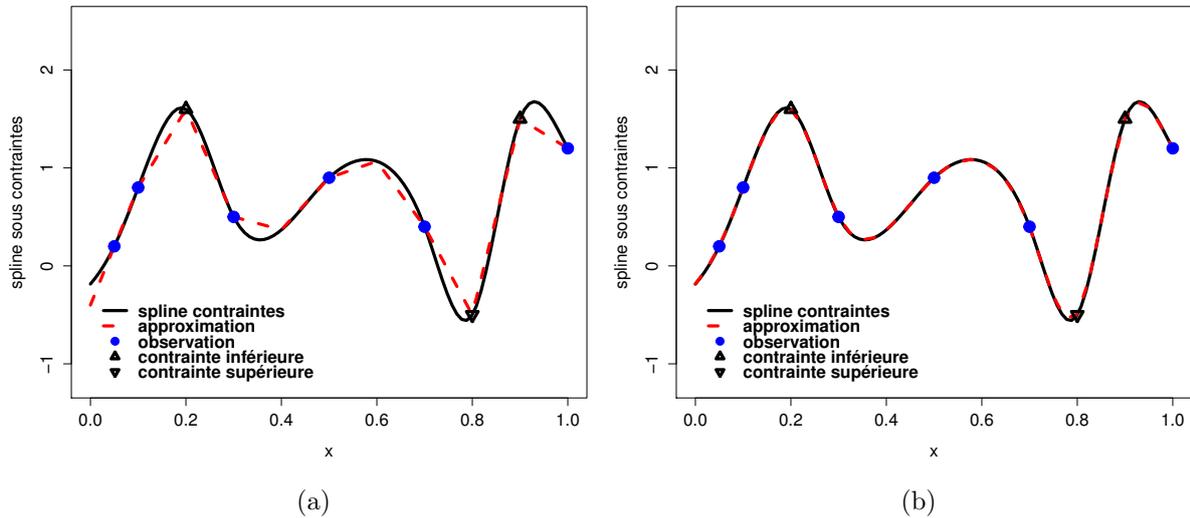


FIGURE 36 – La courbe noire représente la spline d’interpolation sous contraintes en utilisant le noyau Matérn 3/2. La courbe en tirets rouges correspond à la fonction \hat{h}_N pour $N = 10$ (Figure 36a) et $N = 40$ (Figure 36b).

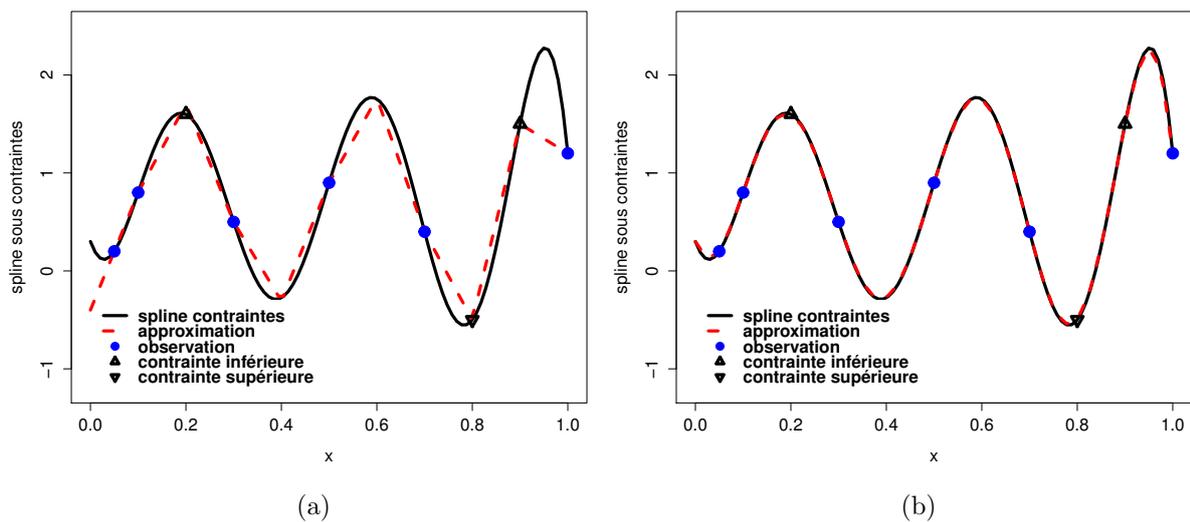


FIGURE 37 – La courbe noire représente la spline d’interpolation sous contraintes en utilisant le noyau gaussien. La courbe en tirets rouges correspond à la fonction \hat{h}_N pour $N = 10$ (Figure 37a) et $N = 40$ (Figure 37b).

où $\phi_{N,j}$, $j = 0, \dots, N$ sont définies dans (6.3). On vérifie :

$$\phi_{i,j}(t_{N,k}, t_{N,l}) = \phi_{N,i}(t_{N,k})\phi_{N,j}(t_{N,l}) = \delta_{i,k}\delta_{j,l}, \quad k, l = 0, \dots, N.$$

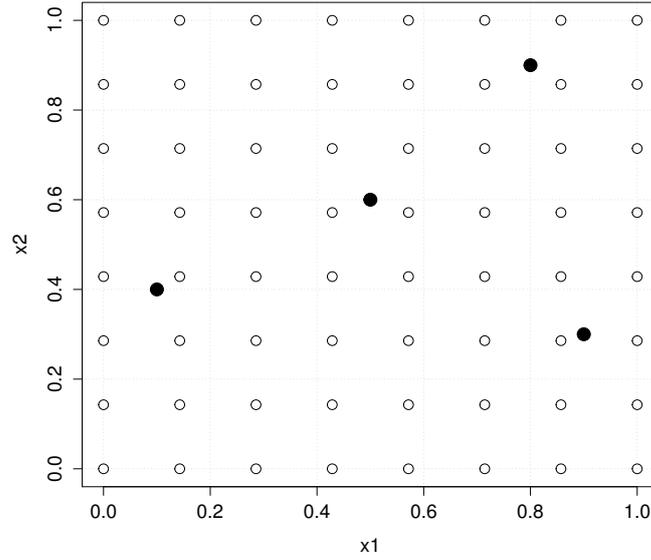


FIGURE 38 – Les points de design pour la monotonie en 2D (points noirs) et la grille utilisée pour construire les fonctions de base.

On rappelle la proposition suivante (cf. Chapitre 3, Section 3.4).

Proposition 13. *Soit h_N un élément de H_N . Alors, $h_N(\mathbf{x}) := \sum_{i,j=0}^N \alpha_{i,j} \phi_{N,i}(x_1) \phi_{N,j}(x_2)$ est croissante par rapport aux deux variables si et seulement si les $(N+1)^2$ coefficients $\alpha_{i,j}$, $i, j = 0, \dots, N$ vérifient les contraintes linéaires suivantes :*

- (i) $\alpha_{i-1,j} \leq \alpha_{i,j}$ et $\alpha_{i,j-1} \leq \alpha_{i,j}$, $i, j = 1, \dots, N$
- (ii) $\alpha_{i-1,0} \leq \alpha_{i,0}$, $i = 1, \dots, N$
- (iii) $\alpha_{0,j-1} \leq \alpha_{0,j}$, $j = 1, \dots, N$

En utilisant la Proposition 10, la solution du problème (P_N) s'écrit sous la forme :

$$\hat{h}_N(\mathbf{x}) = \sum_{i,j=0}^N (\alpha_{opt})_{i,j} \phi_{N,i}(x_1) \phi_{N,j}(x_2),$$

6.4. ILLUSTRATION NUMÉRIQUE

où $\alpha_{opt} = (\alpha_{opt})_{i,j}$ est la solution du problème d'optimisation quadratique suivant :

$$\arg \min_{\substack{\alpha \in \mathbb{R}^{(N+1)^2} \\ \alpha \in \tilde{I} \cap \tilde{C}}} \|\alpha\|_{\mathbb{R}^{(N+1)^2}}^2,$$

$\tilde{C} = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^{(N+1)^2} : \text{les inégalités (i), (ii) et (iii) dans la Proposition 13 sont satisfaites} \right\}$
et \tilde{I} est défini dans (6.15).

Sur la Figure 39, on utilise le noyau bi-gaussien :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{(x_1 - y_1)^2}{2\theta_1^2}\right) \times \exp\left(-\frac{(x_2 - y_2)^2}{2\theta_2^2}\right),$$

avec les paramètres de portée $(\theta_1, \theta_2) = (0.4, 0.4)$. Sur les Figures 39a et 39b, on trace respectivement la solution du problème d'optimisation discrétisé (P_N) \hat{h}_N pour $N = 20$ et les lignes de niveau associées. Remarquons que la fonction \hat{h}_N vérifie les conditions d'interpolation et les contraintes de monotonie par rapport aux deux variables. La Figure 40 montre le cas où la vraie fonction est monotone (croissante) par rapport à la deuxième variable seulement. Dans ce cas, l'espace de contraintes inégalité est $C := \{f \in E : f(x_1, x_2) \leq f(x_1, x'_2), \text{ si } x_2 \leq x'_2\}$, $E = \mathcal{C}^0(X)$.

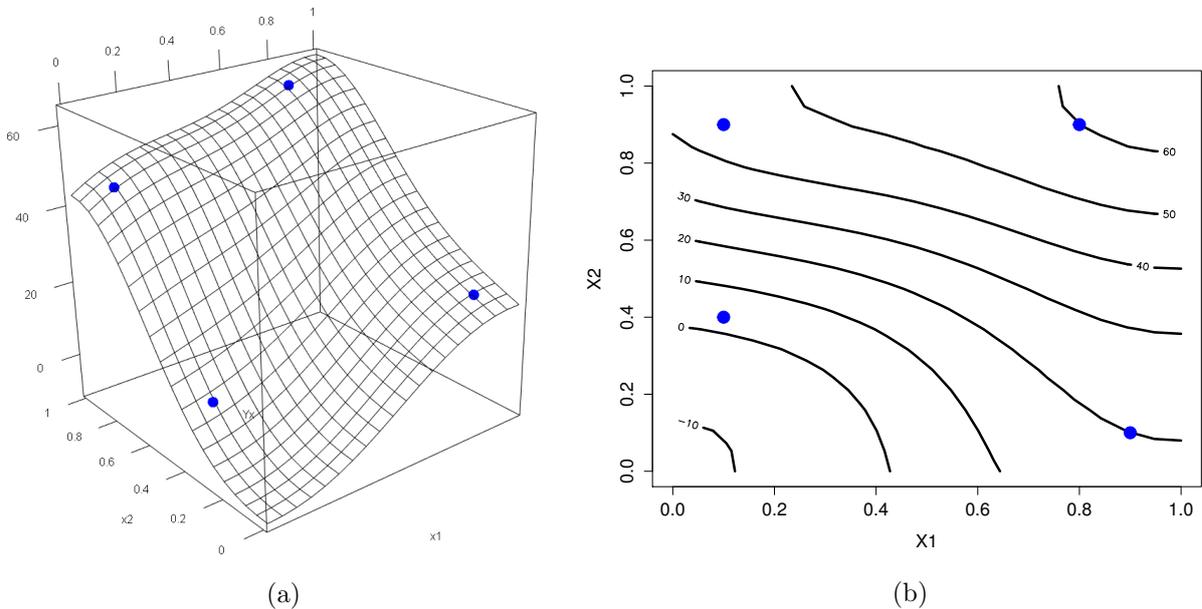


FIGURE 39 – La solution \hat{h}_N du problème d'optimisation discrétisé (P_N) , Figure 39a et les lignes de niveau associées, Figure 39b.

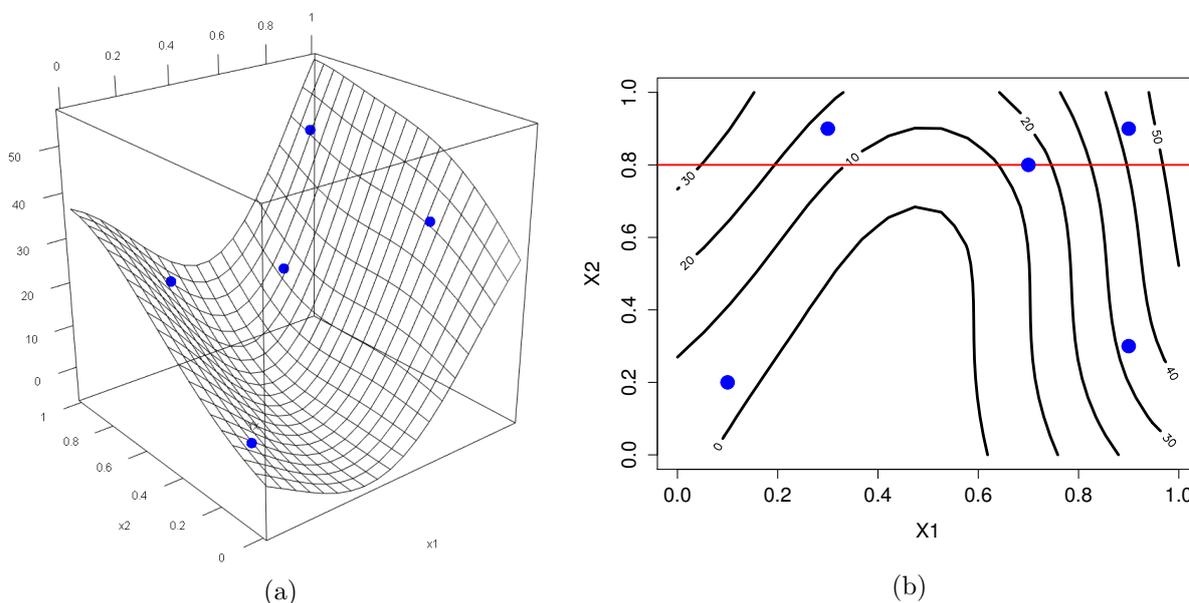


FIGURE 40 – La solution du problème d’optimisation discrétisé (P_N) \hat{h}_N en utilisant la Remarque 2 (Figure 40a) et les lignes de niveau associées (Figure 40b).

6.5 Cas des splines

Le but de cette section est de montrer comment on peut appliquer la méthode décrite dans ce chapitre à des problèmes classiques de splines d’interpolation sous contraintes. On s’intéresse uniquement aux splines cubiques d’interpolation sous contraintes souvent utilisées en pratique.

6.5.1 Spline cubique d’interpolation sous contraintes

Les splines cubiques sont obtenues comme fonctions minimisant le critère d’Énergie Linéaire (EL) suivant, voir [Wolberg and Alfy, 1999]) :

$$E_L = \int_0^1 (f''(t))^2 dt, \quad (6.21)$$

sous les n conditions d’interpolation : $f(x^{(i)}) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. En général, une telle fonction est polynomiale de degré 3 sur chaque sous-intervalle $[x^{(k)}, x^{(k+1)}]$, ($k = 1, \dots, n-1$) :

$$f_k(x) = a_k (x - x^{(k)})^3 + b_k (x - x^{(k)})^2 + c_k (x - x^{(k)}) + d_k, \quad (6.22)$$

où a_k, b_k, c_k, d_k sont les coefficients de la spline. De plus, sur les intervalles $[0, x^{(1)}]$ et $[x^{(n)}, 1]$, la spline cubique est linéaire. Par suite, le critère d’énergie linéaire s’écrit sim-

plement en fonction des coefficients de la spline :

$$\begin{aligned}
 E_L &= \int_{x^{(1)}}^{x^{(n)}} (f''(x))^2 dx \\
 &= \sum_{k=1}^{n-1} \int_{x^{(k)}}^{x^{(k+1)}} (f_k''(x))^2 dx = \sum_{k=1}^{n-1} \int_{x^{(k)}}^{x^{(k+1)}} (6a_k(x - x^{(k)}) + 2b_k)^2 dx \\
 &= \sum_{k=1}^{n-1} 12a_k^2 \Delta (x^{(k)})^3 + 12a_k b_k \Delta (x^{(k)})^2 + 4b_k^2 \Delta x^{(k)}, \tag{6.23}
 \end{aligned}$$

où $\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$.

Sous des contraintes linéaires de type inégalité (comme les contraintes de borne, de monotonie ou de convexité), la fonction qui minimise le critère EL est appelée *spline cubique sous contraintes*. Dans le cas de la monotonie, ce type de problème a été étudié depuis longtemps (voir e.g. [Akima, 1970], [Fritsch and Carlson, 1980], [Hyman, 1983], [Wolberg and Alf, 1999]) et aussi [Dougherty et al., 1989] pour les contraintes de positivité, monotonie et convexité.

On montre maintenant comment adapter notre méthode à cette situation. Tout d'abord le problème (P) se reformule de la manière suivante :

$$\min \left\{ \int_0^1 (h''(t))^2 dt, h \in H^2 \cap C \cap I \right\}, \tag{6.24}$$

où H^2 est l'espace de Sobolev $\{h \in L^2([0, 1]) \text{ telle que } h', h'' \in L^2([0, 1])\}$ et où I et C représentent respectivement les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité. Remarquons que l'espace H^2 est contenu dans $\mathcal{C}^1([0, 1])$ espace des fonctions continûment dérivables sur $X = [0, 1]$. Le critère EL définit seulement une semi-norme. Pour appliquer la méthode décrite dans ce chapitre, on décompose l'espace H^2 selon :

$$H^2 = \mathbb{R} \oplus \mathbb{R}x \oplus H, \tag{6.25}$$

où $H = \{h \in H^2 : h(0) = 0 \text{ et } h'(0) = 0\}$. En effet, pour tout élément h dans H^2 , on a

$$h(x) = h(0) + xh'(0) + g(x),$$

où $g(x) := \int_0^x (x - t)h''(t)dt$. De plus, l'espace de Hilbert H avec le produit scalaire associé $(h_1, h_2)_H = \int_0^1 h_1''(t)h_2''(t)dt$ est un RKHS de noyau reproduisant $K_x(\cdot) = K(\cdot, x)$ tel que :

$$\forall x \in X, h \in H, \quad h(x) = (h, K_x(\cdot))_H = \int_0^1 K_x''(t)h''(t)dt.$$

Comme $h(x) = h(0) + h'(0)x + \int_0^x (x-t)h''(t)dt$, on obtient $K_x''(t) = (x-t)\mathbb{1}_{[0,x]}(t)$, ce qui implique :

$$K_x'(t) = \begin{cases} \frac{x^2}{2} - \frac{(x-t)^2}{2} & \text{si } t \leq x \\ \frac{x^2}{2} & \text{si } t \geq x, \end{cases}$$

puis :

$$K(x, x') = \begin{cases} \frac{x^2}{2}(x' - \frac{x}{3}) & \text{si } x \leq x' \\ \frac{x'^2}{2}(x - \frac{x'}{3}) & \text{si } x \geq x'. \end{cases}$$

En utilisant l'équation (6.25), le problème d'optimisation (6.24) peut se mettre sous la forme :

$$\min_{\substack{h \in H \\ \alpha + \beta x^{(i)} + h(x^{(i)}) = y_i \\ \alpha + \beta x + h(x) \in C}} \int_0^1 (h''(t))^2 dt = \|h\|_H^2.$$

Le problème d'optimisation discrétisé (P_N) devient

$$\arg \min_{\substack{\alpha, \beta, h_N \in H_N \\ \alpha + \beta x^{(i)} + h_N(x^{(i)}) = y_i \\ \alpha + \beta x + h_N(x) \in C}} \|h_N\|_{H_N}^2, \quad (6.26)$$

D'après la Proposition 10, la solution du problème d'optimisation fini-dimensionnel (6.26) est égale à

$$\hat{h}_N(x) = \alpha_{opt} + \beta_{opt}x + \sum_{j=1}^N \beta_{opt,j} \phi_{N,j}(x),$$

où le vecteur $(\alpha_{opt}, \beta_{opt}, \beta_{opt,1}, \dots, \beta_{opt,N})^\top$ est la solution du problème d'optimisation quadratique suivant :

$$\arg \min_{\substack{\alpha, \beta, \beta_j, j=1, \dots, N \\ \alpha + \beta x^{(i)} + h_N(x^{(i)}) = y_i \\ \alpha + \beta x + h_N(x) \in C}} \gamma^\top (\Gamma^N)^{-1} \gamma, \quad (6.27)$$

où $h_N(x) := \sum_{j=1}^N \beta_j \phi_{N,j}(x)$, $\gamma := (\alpha, \beta, \beta_1, \dots, \beta_N)^\top \in \mathbb{R}^{N+2}$ et où

$$\Gamma^N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \mathbf{0}^\top \\ 0 & 0 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \Gamma_{i,j}^N \end{bmatrix},$$

avec $\Gamma_{i,j}^N := K(t_{N,i}, t_{N,j})$ $i, j = 1, \dots, N$ et $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)^\top \in \mathbb{R}^N$.

6.5.2 Spline cubique sous contrainte de borne

Dans cette section, on suppose que la vraie fonction prend des valeurs entre -1.2 et 1 (respectivement positives) sur $[0, 1]$ et qu'elle est évaluée aux points d'observation définis dans la Table 6.1 (respectivement la Table 6.2).

TABLE 6.1 – Observations bornées sur $[0, 1]$.

Variables	Values				
x	0.1	0.15	0.5	0.7	0.95
$f(x)$	-0.1	0.8	-1	0.9	0.1

TABLE 6.2 – Observations positives sur $[0, 1]$.

Variables	Values				
x	0.06	0.12	0.5	0.6	0.95
$f(x)$	0.1	0.8	1	0.4	0.02

Dans ce cas, l'espace convexe C est défini par :

$$C = \{f \in \mathcal{C}^0([0, 1]) : -1.2 \leq f(x) \leq 1, x \in [0, 1]\}.$$

Le problème d'optimisation quadratique (6.27) s'écrit :

$$\arg \min_{\substack{\alpha, \beta, \beta_j, j=1, \dots, N \\ \alpha + \beta x^{(i)} + h_N(x^{(i)}) = y_i \\ -1.2 \leq \alpha + \beta t_{N,j} + h_N(t_{N,j}) \leq 1}} \gamma^\top (\Gamma^N)^{-1} \gamma.$$

La Figure 41 montre la solution \hat{h}_N du problème discrétisé (6.26) (courbe en rouge) et la spline cubique obtenue sans tenir compte des contraintes inégalité (courbe en noir). Cette dernière ne respecte que les conditions d'interpolation contrairement à la première (cf. Figure 41a et Figure 41b). Sur cet exemple numérique, on vérifie un résultat établi par Dontchev dans son article [Dontchev, 1993].

6.5.3 Spline cubique monotone

L'objectif de cette dernière sous-section est de comparer les algorithmes classiques de splines cubiques monotones. Pour cela, on considère des données déjà utilisées dans la littérature pour comparer différentes méthodes. On commence tout d'abord par les données utilisées dans [Fritsch and Carlson, 1980] (Fritsch-Carlson (FC), RPN 15A

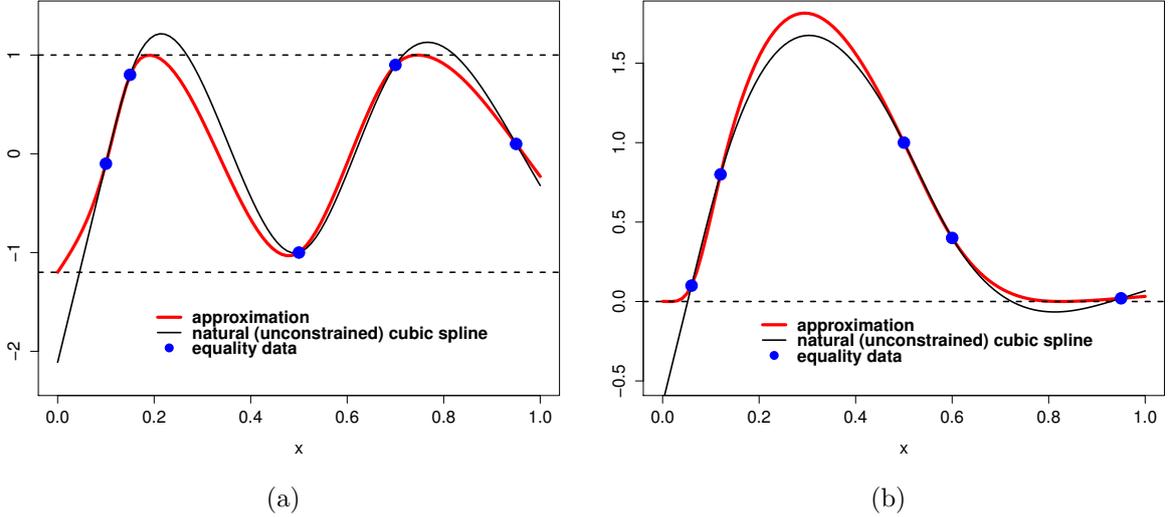


FIGURE 41 – Spline cubique dans une bande (respectivement positive) Figure 41a (resp. Figure 41b) et spline cubique sans tenir compte des contraintes (courbe en noir).

data). Ces observations sont définies dans la Table 6.3 et sont monotones croissantes. Elle ont été utilisées pour comparer différents algorithmes (voir e.g. [Akima, 1970], [Fritsch and Carlson, 1980] et [Hyman, 1983]).

Sur la Figure 42a, on utilise les données de FC. On représente les splines cubiques monotones obtenues par quatre méthodes différentes : l’algorithme décrit dans ce chapitre (courbe en rouge), l’algorithme de Hyman (courbe en bleu), l’algorithme de FC (courbe en vert) et finalement l’algorithme proposé par Akima (courbe en noir). Remarquons que seulement la dernière spline n’est pas monotone. La Figure 42b montre la différence entre les splines proposées par ‘Hyman’ et ‘FC’ qui sont très proches l’une de l’autre. Pour comparer ces deux méthodes avec le critère EL, on trace sur la Figure 43b la fonction $f''(x)^2$ associée. Le critère EL dans ce cas est égal à l’intégrale de ces deux fonctions. Ainsi, le critère EL est légèrement plus faible pour la méthode de ‘Hyman’. En appliquant l’équation (6.23) à la solution analytique établie dans [Hyman, 1983], on obtient $E_L = 9.35$. Comme la solution proposée dans ce chapitre est une fonction linéaire par morceaux, le critère EL associé n’est pas défini à partir de la formule intégrale. Néanmoins, il est calculé en appliquant l’équation (6.26) à la fonction \hat{h}_N :

$$\|\hat{h}_N\|_{H_N}^2 = \lambda_N^\top (\Gamma^N)^{-1} \lambda_N,$$

où $\lambda_N = (\alpha_{opt}, \beta_{opt}, \beta_{opt,1}, \dots, \beta_{opt,N})^\top$. Rappelons que ce critère approché converge vers la valeur optimale du critère EL (voir Théorème 10). La Figure 43a montre les valeurs

TABLE 6.3 – RPN 15A Fritsch-Carlson’s data (LLL radiochemical calculations).

x	$f(x)$
7.99	0
8.09	2.76429e-5
8.19	4.37498e-2
8.7	0.169183
9.2	0.469428
10	0.943740
12	0.998636
15	0.999919
20	0.999994

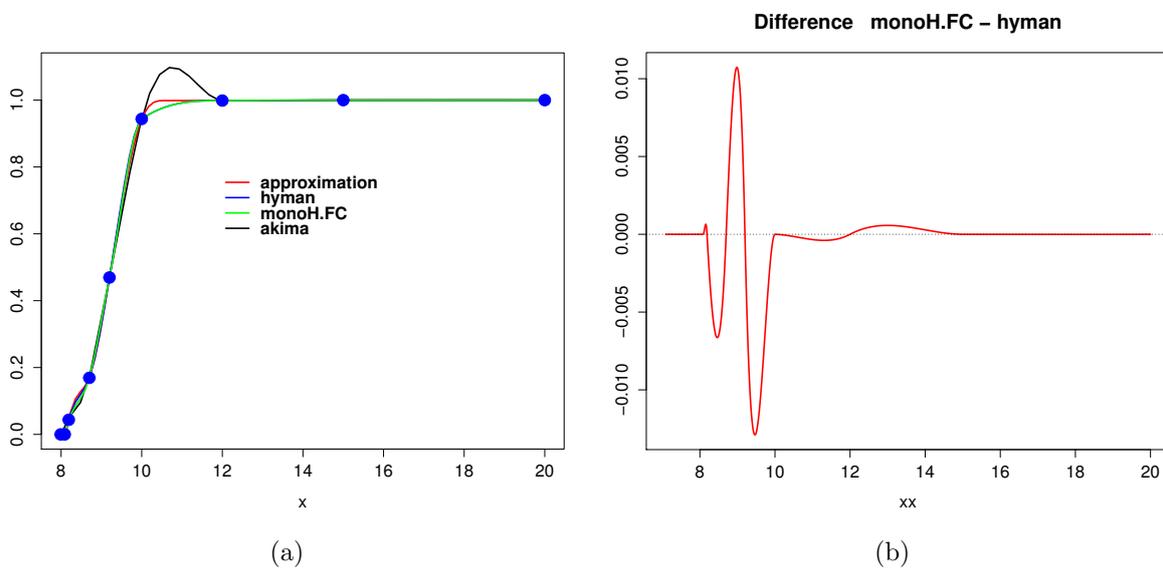


FIGURE 42 – Spline cubique monotone en utilisant quatre méthodes différentes (Figure 42a). Différence entre les deux splines proposées par FC et Hyman (Figure 42b).

$\|\hat{h}\|_{H_N}^2$ pour différentes valeurs de N . Elles sont beaucoup plus faibles que la valeur du critère EL associée à la méthode de Hyman (par exemple $\|\hat{h}\|_{H_N}^2 = 2$ pour $N = 100$ contre $E_L = 9.35$).

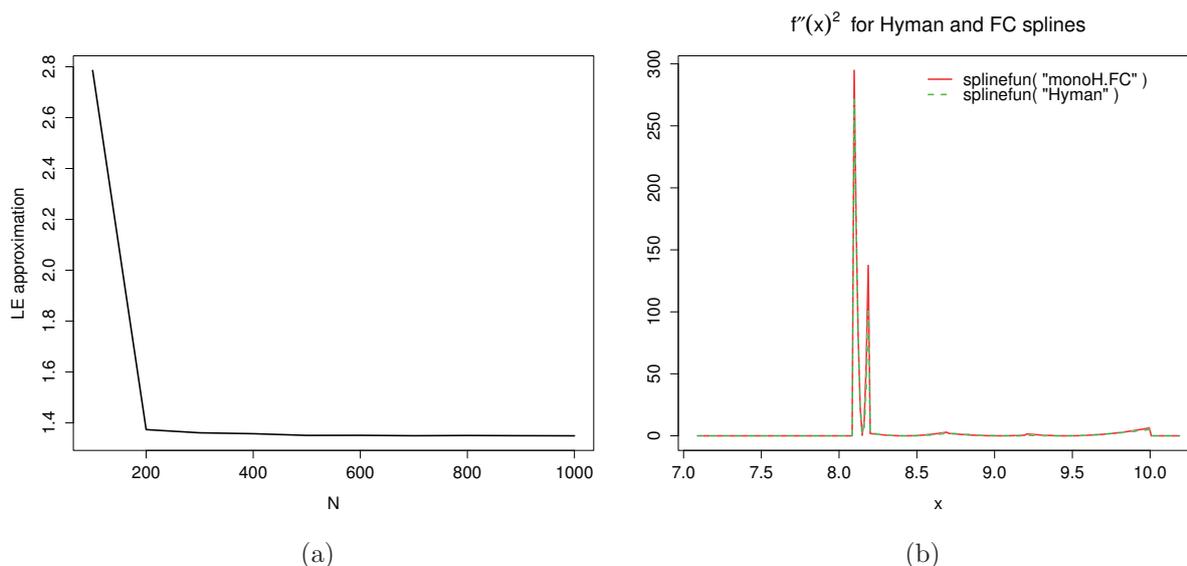


FIGURE 43 – Le critère EL approché associé à l’algorithme décrit dans ce chapitre en utilisant les observations de FC (Figure 43a). Comparaison entre “Hyman” et “FC” splines (Figure 43b).

Ensuite, on considère les observations qui sont utilisées dans [Akima, 1970] et qui sont définies dans la Table 6.4. Ces données monotones sont encore utilisées pour comparer différentes méthodes (voir e.g. [Fritsch and Carlson, 1980], [Hyman, 1983] et [Wolberg and Alf, 1999]).

TABLE 6.4 – Les données de Akima utilisées pour comparer différentes méthodes.

Variables	Values										
x	0	2	3	5	6	8	9	11	12	14	15
$f(x)$	10	10	10	10	10	10	10.5	15	50	60	85

La Figure 44 montre les splines cubiques monotones en utilisant 4 méthodes différentes : La spline cubique décrite dans ce chapitre (courbe en rouge), la spline en utilisant la méthode de Hyman (courbe en bleu), la spline de FC (courbe en vert) et finalement la spline proposée par Akima (courbe en noir). D’après [Fritsch and Carlson, 1980], la méthode proposée par Akima élimine le “bump” mais la solution n’est pas monotone

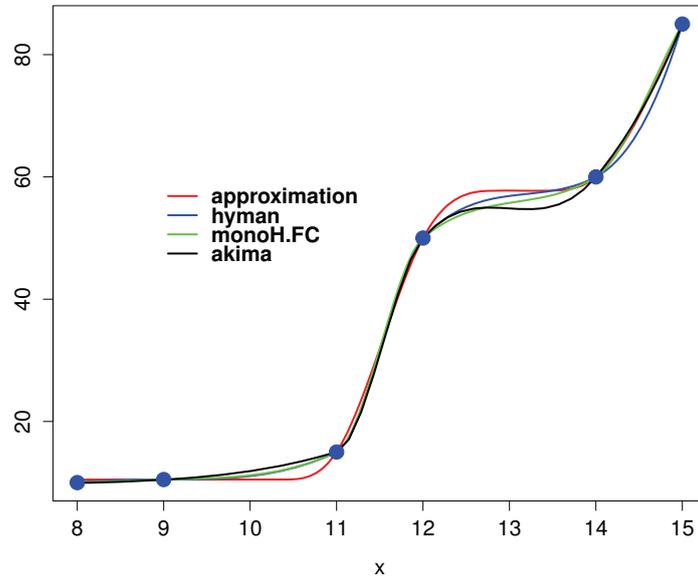


FIGURE 44 – Splines cubiques monotones par quatre méthodes différentes en utilisant les données de Akima. La courbe rouge représente la solution proposée dans ce chapitre. Elle est monotone sur tout le domaine.

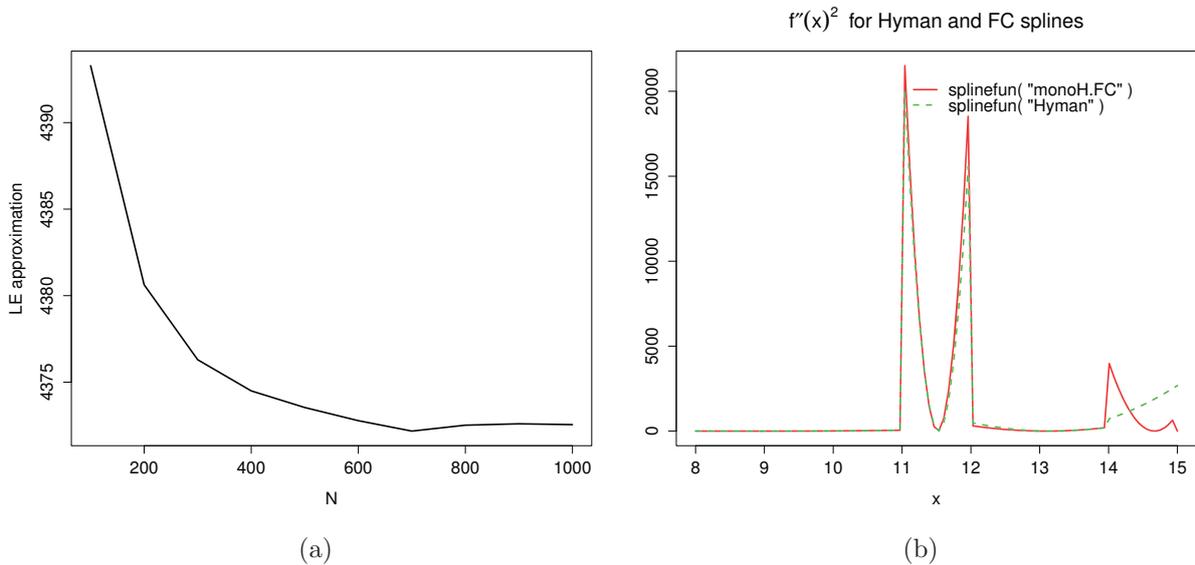


FIGURE 45 – Le critère EL approché associé à la solution proposée dans ce chapitre en utilisant les données de Akima (Figure 45a). Comparaison entre les splines cubiques monotones proposées par ‘Hyman’ et ‘FC’ (Figure 45b).

sur l'intervalle $(12, 14)$. Les trois autres splines sont monotones (croissantes). Sur la Figure 45b, on compare les splines proposées par 'Hyman' et 'FC' avec le critère EL. En utilisant l'équation (6.23), la valeur du critère EL pour la méthode de Hyman est égale à 8939.78. Sur la Figure 45a, on représente la fonction $\|\hat{h}\|_{H_N}^2$ avec les données de Akima. Elles sont beaucoup plus petites que celles de Hyman.

Finalement, on considère les données monotones utilisées dans [Wolberg and Alf, 1999] et [Wolberg and Alf, 2002]. Ces données sont définies dans la Table 6.5 et on les utilise pour comparer notre méthode avec 7 algorithmes différents (qui ne sont pas décrits dans ce chapitre).

TABLE 6.5 – Les données monotones de Wolberg.

Variables	Values											
x	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0
$f(x)$	0.0	1.0	4.8	6.0	8.0	13.0	14.0	15.5	18.0	19.0	23.0	24.1

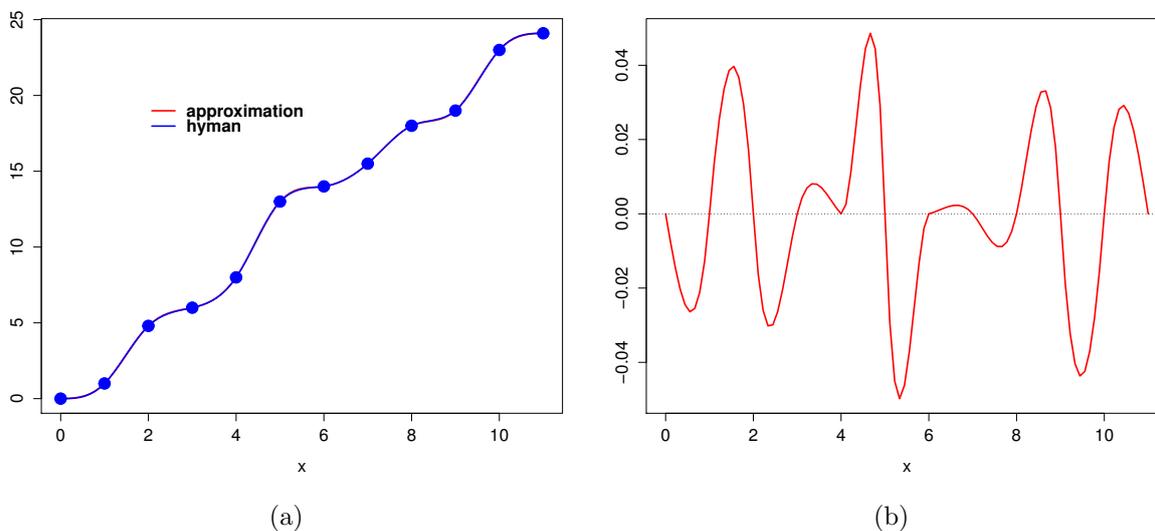


FIGURE 46 – Splines cubiques monotones en utilisant les données de Wolberg : la méthode de Hyman (courbe en bleu) et la fonction \hat{h}_N avec $N = 1000$ (courbe en rouge). La différence entre ces deux fonctions est illustrée sur la Figure 46b.

Sur la Figure 46a, on représente les splines cubiques monotones en utilisant la méthode décrite dans ce chapitre (courbe en rouge) et la méthode de Hyman (courbe en bleu). La différence entre ces deux fonctions est illustrée sur la Figure 46b. La Figure 47 montre la fonction $\|\hat{h}\|_{H_N}^2$ pour différentes valeurs de N . Ces valeurs sont comparées avec celle qui est

6.6. CONCLUSION

optimale dans la Table 6.6 (voir [Wolberg and Alf, 1999]). Les valeurs de la Table 6.6 sont issues du papier de Wolberg [Wolberg and Alf, 1999] sauf les valeurs associées à notre méthode (approximation) et celle de Hyman. Remarquons que la valeur de LE approchée en utilisant notre méthode converge exactement vers la valeur optimale de la Table 6.6 qui vaut 131.68. Cela signifie que la solution proposée dans ce chapitre converge bien vers la spline cubique monotone optimale. Dans ce cas, elle minimise le critère EL.

TABLE 6.6 – Le critère de l'énergie linéaire pour différentes méthodes en utilisant les données de Worlberg.

Method	E_L
approximation	131.68
Hyman	133.19
CSE	132.91
FE	131.68
LE	131.68
SDDE	223.55
MDE	131.71
FB	236.30

6.6 Conclusion

Dans ce chapitre, on a considéré le problème d'interpolation sous contraintes comme un problème d'optimisation convexe dans un RKHS H . On suppose que H est contenu dans un espace de Banach E , espace de fonctions continues sur un ensemble X compact.

Une méthode d'approximation dans E a été proposée. Par construction, les fonctions obtenues respectent les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité.

Le résultat principal de ce chapitre est la convergence de la solution proposée (avec la dimension de l'espace d'approximation H_N) dans l'espace E (i.e. convergence uniforme). Pour le cas de contraintes de monotonie et de borne, on a montré que le problème d'optimisation discrétisé est équivalent à un problème quadratique. Deux exemples numériques en dimension 1 et 2 ont été étudiés. La méthode proposée est basée sur deux étapes. La première est de discrétiser la norme de l'espace H (critère de régularité) en utilisant explicitement la forme analytique de son noyau reproduisant. La seconde est de définir les espaces d'approximation H_N de sorte que l'ensemble des contraintes puisse être réduit à un nombre fini de contraintes dans les sous-espaces H_N .

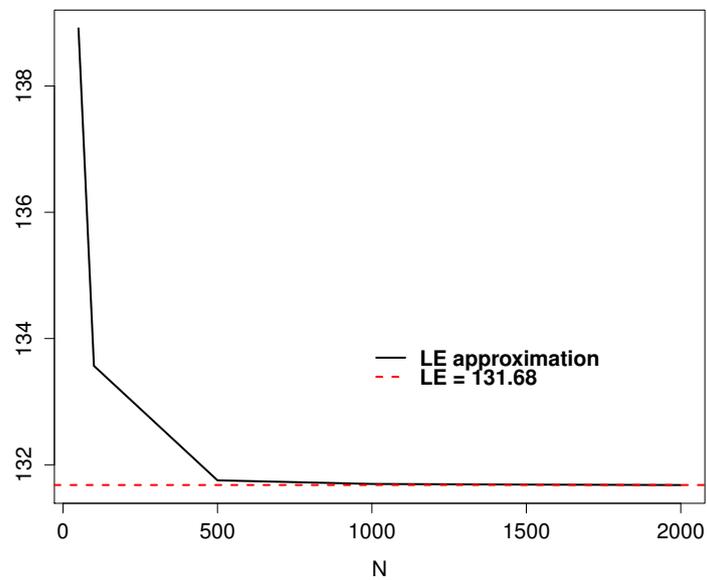


FIGURE 47 – Le critère EL approché pour l’algorithme décrit dans ce chapitre en utilisant les données de Wolberg.

6.6. CONCLUSION

Chapitre 7

Correspondance entre krigeage et splines dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité

Sommaire

7.1	Rappel : splines d'interpolation sous contraintes	147
7.2	Estimation bayésienne	148
7.3	Correspondance dans le cas de la dimension finie	149
7.4	Le résultat principal	152
7.4.1	Loi <i>a priori</i>	152
7.4.2	Approximation et loi <i>a posteriori</i>	152
7.4.3	Analyse asymptotique	153
7.5	Illustration numérique	159
7.6	Conclusion	160

7.1 Rappel : splines d'interpolation sous contraintes

On reprend le problème général d'interpolation d'une fonction réelle. On note encore $D = \{(x^{(i)}, y_i), i = 1, \dots, n\}$ les points d'observation. Pour simplifier, la variable d'entrée x est supposée dans l'intervalle compact $X = [0, 1]$, mais les résultats présentés dans ce chapitre se généralisent au cas multi-dimensionnel. Soient $H \subset \mathbb{R}^X$ un RKHS et C un ensemble convexe fermé de H . Rappelons que C traduit un ensemble de contraintes linéaires de type inégalité sur la fonction à interpoler (e.g. contraintes de borne, de monotonie, etc). On dénote par I l'espace des fonctions interpolantes :

$$\{f \in \mathbb{R}^X : f(x^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n\}.$$

Supposons que $C \cap I$ soit non vide. On considère le problème d'optimisation suivant :

$$\arg \min_{h \in C \cap I} \|h\|_H^2. \quad (P)$$

La solution unique h_{opt} du problème (P) est appelée spline d'interpolation sous contraintes associée aux nœuds $x^{(i)}$, $i = 1, \dots, n$. En général, $\|h\|_H^2$ traduit un critère de régularité sur la fonction à interpoler. Ainsi, h_{opt} est l'interpolateur optimal sous contraintes associé aux données D .

Ce chapitre est organisé comme suit : tout d'abord, on rappelle brièvement dans la Section 7.2 la correspondance naturelle entre l'interpolation optimale dans un RKHS et l'estimation bayésienne dans le cadre classique. Ensuite, dans la Section 7.3, on établit la correspondance en dimension finie dans le cas de contraintes de type inégalité. On montre que l'estimateur MAP (Maximum *A posteriori*) de la loi *a posteriori* du processus gaussien fini-dimensionnel est la spline d'interpolation contrainte. Dans le cas général (cf. Section 7.4), on montre par approximation que l'estimateur MAP de la loi *a posteriori* du processus gaussien est bien défini et correspond à la spline d'interpolation contrainte. Un exemple numérique pour vérifier ce résultat est donné dans la Section 7.5.

7.2 Estimation bayésienne

On considère une fonction $\{y(x), x \in X\}$ à estimer à partir d'observations : $y(x^{(i)}) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. Lorsque la loi *a priori* est une mesure gaussienne centrée sur \mathbb{R}^X ou de manière équivalente, un processus gaussien centré $(Y(x))_{x \in X}$, l'estimateur bayésien $\hat{y}(x)$ de $y(x)$ est la moyenne de la distribution *a posteriori* de $Y(x)$, i.e.

$$\hat{y}(x) = \mathbb{E}(Y(x) \mid Y(x^{(1)}) = y_1, \dots, Y(x^{(n)}) = y_n).$$

Sans perte de généralité, on suppose que Y est un processus gaussien centré de fonction de covariance K . Alors (cf. Chapitre 2, Section 2.5.2)

$$\hat{y}(x) = \mathbf{k}(x)^\top \mathbb{K}^{-1} \mathbf{y}, \quad x \in X,$$

où $\mathbf{k}(x)$ est le vecteur des covariances entre $Y(x)$ et $Y(x^{(i)})$, $i = 1, \dots, n$ et où \mathbb{K} est la matrice de covariance des observations et $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$.

Comme la moyenne et le mode coïncident pour n'importe quelle distribution gaussienne en dimension finie, on peut considérer $\hat{y}(x)$ comme l'estimateur du Maximum de vraisemblance *A Posteriori* (MAP) de $y(x)$ (conditionnellement aux données d'observations D). Un résultat (cf. Chapitre 2, Section 2.5.2) dit que la fonction $\hat{y} = \{\hat{y}(x), x \in X\}$ est aussi l'unique solution du problème d'optimisation suivant :

$$\arg \min_{h \in H \cap I} \|h\|_H^2,$$

où H est le RKHS associé à la fonction de type positif K .

Maintenant, on suppose que la fonction à estimer y vérifie certaines propriétés. Nous notons C l'espace des fonctions correspondantes. Par exemple, C est de la forme

$$C = \{f \in \mathbb{R}^X : a \leq f(x) \leq b, \forall x \in X\},$$

avec $-\infty \leq a \leq b \leq +\infty$ des valeurs explicites. Dans le cas de la monotonie croissante, C est de la forme :

$$C = \{f \in \mathbb{R}^X : \forall x \leq x', f(x) \leq f(x')\},$$

et, finalement,

$$C = \{f \in \mathbb{R}^X, \forall \lambda \in [0, 1], \forall x, x', f(\lambda x + (1 - \lambda)x') \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(x')\}$$

représente le cas de fonctions convexes. Notons que dans ces trois situations, ainsi que toute combinaison de ces cas, C est un espace convexe fermé de \mathbb{R}^X (muni de la topologie de la convergence simple).

Dans un cadre bayésien, le problème est de calculer la distribution du processus gaussien $Y(x)$ sachant $Y \in C$ et $Y(x^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n$. Cette distribution conditionnelle est une distribution d'une loi normale multivariée tronquée dans un espace vectoriel de dimension infinie. Le but de ce chapitre est de montrer que la spline d'interpolation sous contraintes h_{opt} , solution unique du problème d'optimisation suivant

$$\arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2,$$

est le mode (ou MAP) de cette loi *a posteriori*. La difficulté du problème vient du fait qu'il n'y a pas d'analogie à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^X ou sur un espace de dimension infinie. Ainsi, la vraisemblance *a posteriori* n'est pas définie et, par suite, le problème devient mal posé. Pour contourner cette difficulté, on va devoir définir l'estimateur MAP d'une manière différente. On commence par le cas de la dimension finie pour établir la correspondance naturelle entre spline d'interpolation sous contraintes et estimateur bayésien.

7.3 Correspondance dans le cas de la dimension finie

Supposons que le processus gaussien soit fini-dimensionnel (ou de dimension finie) au sens où

$$Y(x) := \sum_{j=1}^N \xi_j \phi_j(x), \quad x \in X,$$

7.3. CORRESPONDANCE DANS LE CAS DE LA DIMENSION FINIE

avec $\{\phi_j, j = 1, \dots, N\}$ N un ensemble de fonctions linéairement indépendantes dans \mathbb{R}^X et $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)^\top \in \mathbb{R}^N$ un vecteur gaussien centré de matrice de covariance Γ supposée inversible. Dans ce cas, la fonction de covariance du processus gaussien Y est de la forme :

$$K(x, x') = \phi(x)^\top \Gamma \phi(x'),$$

où $\phi(x) = (\phi_1(x), \dots, \phi_N(x))^\top$. De plus, le RKHS correspondant est

$$H = \left\{ h \in \mathbb{R}^X : h = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j \right\},$$

de norme $\|h\|_H^2 = c_h^\top \Gamma^{-1} c_h$, où $c_h = (c_1, \dots, c_N)^\top$ est le vecteur de coordonnées de h dans la base $\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ de H . Il est clair que, $(H, \|\cdot\|_H)$ est un espace de Hilbert de noyau reproduisant K . En effet, $K(\cdot, x) = \phi(\cdot)^\top \Gamma \phi(x) \in H$ et

$$(h, K(\cdot, x))_H = (\phi^\top c_h, \phi^\top \Gamma \phi(x))_H = c_h^\top \Gamma^{-1} \Gamma \phi(x) = c_h^\top \phi(x) = h(x).$$

L'espace vectoriel H étant de dimension finie, il existe une et une seule topologie d'espace vectoriel normé (ou semi-normé). De plus, il existe alors une unique mesure borélienne (à une constante multiplicative près) qui soit invariante par translation dans H (et finie sur les bornés) : c'est la mesure de Lebesgue λ_H sur H ou encore *la mesure uniforme*. On peut donc définir la fonction de vraisemblance du processus Y à valeurs dans H comme la densité de Y relativement à cette mesure canonique sur H . Pour en donner une expression explicite, on considère l'isomorphisme linéaire $i : c \in \mathbb{R}^N \rightarrow h := \sum_{j=1}^N c_j \phi_j \in H$. On peut prendre la mesure de Lebesgue λ_H sur H comme mesure image $\lambda_H := i(dc)$, où $dc = dc_1 \times \dots \times dc_N$ est la mesure de volume N -dimensionnelle sur \mathbb{R}^N (mesure de Lebesgue usuelle). Par suite, si $B \in \mathcal{B}(H)$ est un borélien de H , on a

$$\lambda_H(B) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathbf{1}_B(i(c)) dc_1 \times \dots \times dc_N.$$

Pour calculer la densité de probabilité du processus Y , on écrit

$$\mathbb{P}(Y \in B) = \mathbb{P}(\xi \in i^{-1}(B)).$$

En utilisant le fait que le vecteur ξ est gaussien de loi $\mathcal{N}(0, \Gamma)$, on a

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y \in B) &= \int_{\mathbb{R}^N} \mathbf{1}_{i^{-1}(B)}(c) \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\Gamma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} c^\top \Gamma^{-1} c\right) dc \\ &= \int_{\mathbb{R}^N} \mathbf{1}_B(i(c)) \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\Gamma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \|i(c)\|_H^2\right) dc \end{aligned}$$

Par la formule de transfert, on obtient finalement

$$\mathbb{P}(Y \in B) = \int_H \mathbb{1}_B(h) \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\Gamma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \|h\|_H^2\right) d\lambda_H(h).$$

La densité de Y par rapport à la mesure λ_H est donc égale à

$$h \in H \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\Gamma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \|h\|_H^2\right).$$

Supposons maintenant que C soit un sous-espace convexe fermé de \mathbb{R}^X tel que $\widehat{H \cap C} \neq \emptyset$. Dans ce cas, $H \cap C$ représente l'espace des fonctions dans H qui respectent les contraintes linéaires de type inégalité. Dans le cadre bayésien, la loi *a priori* est la densité de probabilité tronquée suivante :

$$h \in H \longrightarrow k^{-1} \mathbb{1}_{h \in H \cap C} \exp\left(-\frac{1}{2} \|h\|_H^2\right),$$

où k est une constante de normalisation ($k \neq 0$ puisque $\widehat{H \cap C} \neq \emptyset$). Supposons encore que $\widehat{H \cap C} \cap I$ soit non vide, la vraisemblance *a posteriori* L_{pos} est la densité de probabilité de Y sachant $Y \in C$ et $Y \in I$. Elle est de la forme

$$L_{pos}(h) = k^{-1} \mathbb{1}_{h \in H \cap C \cap I} \exp\left(-\frac{1}{2} \|h\|_H^2\right), \quad (7.1)$$

où k est une nouvelle constante de normalisation. La fonction L_{pos} est la densité de la loi normale multivariée tronquée relativement à la mesure de Lebesgue sur le sous-espace affine

$$I \cap H = \{h \in H : h(x^{(i)}) = y_i, i = 1, \dots, n\}$$

de dimension $N - n$ en général.

Par définition, l'estimateur MAP \hat{y} de $y(\cdot)$ est la solution du problème d'optimisation suivant

$$\arg \max_{h \in H} L_{pos}(h) = \arg \min_{h \in H} (-2 \log L_{pos}(h)).$$

Compte tenu de l'équation (7.1), l'estimateur MAP \hat{y} est égal à la spline d'interpolation sous contraintes h_{opt} solution du problème d'optimisation convexe

$$\arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2.$$

Ainsi, dans le cas d'un processus gaussien de dimension finie, l'estimateur bayésien \hat{y} est exactement la spline d'interpolation sous contraintes h_{opt} .

7.4 Le résultat principal

7.4.1 Loi *a priori*

Soit $(Y(x))_{x \in X}$ un processus gaussien centré de fonction de covariance K . Dans cette section, Y n'est plus un processus gaussien de dimension finie comme dans la Section 7.3. Par contre, on suppose que le processus Y est à trajectoires dans l'espace de Banach $E = \mathcal{C}^0(X)$, espace des fonctions continues sur le compact X . Le RKHS H de noyau reproduisant K est inclus continûment dans $\mathcal{C}^0(X)$ puisque

$$\|h\|_E = \sup_{x \in X} |(h, K(\cdot, x))_H| \leq c \times \|h\|_H,$$

avec $c = \sup_{x \in X} K(x, x)^{1/2} < +\infty$. C'est donc un sous-espace hilbertien de E : $H \in \text{Hilb}(E)$, voir Définition 3.

On considère maintenant un ensemble convexe fermé C de \mathbb{R}^X comme dans la Section 7.2. L'espace $C \cap E$ est un espace convexe fermé de E ¹. Cet espace traduit l'information *a priori* sur la fonction $y(x)$ qu'on cherche à estimer, on le notera encore C .

La loi *a priori* peut être vue comme une mesure gaussienne tronquée au convexe fermé C dans l'espace $E = \mathcal{C}^0(X)$ de dimension infinie.

7.4.2 Approximation et loi *a posteriori*

Le MAP comme estimateur bayésien nécessite de définir la vraisemblance relativement à la mesure de Lebesgue (ou son analogue). Comme cette fonction n'existe pas en général dans le cas de dimension infinie, on considère l'approximation suivante du processus gaussien initial Y (cf. Chapitre 3, Section 3.2) :

$$Y^N(x) = \sum_{j=0}^N Y(t_{N,j}) \phi_{N,j}(x), \quad x \in X,$$

où $0 = t_{N,0} < t_{N,1} < \dots < t_{N,N} = 1$ est une subdivision de $X = [0, 1]$ et où les $\phi_{N,j}$ sont les fonctions chapeau associées aux nœuds de cette subdivision

$$\phi_{N,j}(t_{N,i}) = \delta_{i,j}, \quad i, j = 0, \dots, N.$$

Par application de la Section 7.3, on peut calculer la fonction de vraisemblance *a posteriori* et son mode \hat{y}_N comme fonction définie sur X . Sans perte de généralité, on

1. L'application $f \in E \rightarrow f \in \mathbb{R}^X$ est continue.

suppose $\Gamma^N := (K(t_{N,i}, t_{N,j}))_{0 \leq i, j \leq N}$ inversible.

Par la Section 7.3, on a le résultat suivant :

Proposition 14. *Le processus Y^N est une approximation de dimension finie du processus gaussien centré Y , de fonction de covariance*

$$K_N(x, x') = \sum_{i,j=0}^N K(t_{N,i}, t_{N,j}) \phi_{N,i}(x) \phi_{N,j}(x').$$

De plus, le RKHS correspondant est $H_N := \text{Vect}\{\phi_{N,j}, j = 0, \dots, N\}$ de norme définie par

$$\|h\|_{H_N}^2 = c_h^\top (\Gamma^N)^{-1} c_h,$$

où $c_h = (h(t_{N,0}), \dots, h(t_{N,N}))^\top$. La vraisemblance a posteriori de Y^N sachant $Y^N \in C$ et $Y^N \in I$ est de la forme

$$L_{pos}^N(h) = k_N^{-1} \mathbf{1}_{h \in H_N \cap C \cap I} \exp\left(-\frac{1}{2} \|h\|_{H_N}^2\right).$$

L'estimateur \hat{y}_N du Maximum de Vraisemblance A Posteriori est la solution $h_{opt,N}$ du problème d'optimisation

$$\arg \min_{h \in H_N \cap C \cap I} \|h\|_{H_N}^2.$$

7.4.3 Analyse asymptotique

Pour établir la correspondance entre $\hat{y} := \lim_{N \rightarrow +\infty} \hat{y}_N$ dans E et la spline d'interpolation sous contraintes h_{opt} dans H :

$$h_{opt} = \arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2,$$

on a besoin de décrire la relation entre la suite croissante des sous-espaces $(H_N)_N$ de E (et non pas de H) et le RKHS H de noyau reproduisant K .

On note π_N l'opérateur de projection de E dans H_N (cf. Chapitre 6, Section 6.3.1) défini par :

$$\forall f \in E, \quad \pi_N(f) = \sum_{j=0}^N f(t_{N,j}) \phi_{N,j}.$$

7.4. LE RÉSULTAT PRINCIPAL

Théorème 11. Pour tout $f \in E$, $\left(c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f)\right)_{N \geq 1}$ est une suite positive croissante, où $c_N(f) = (f(t_{N,0}), \dots, f(t_{N,N}))^\top$. De plus,

$$H = \{f \in E : f = \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{i=0}^N c_{N,i} \phi_{N,i}, \text{ où } c_N = c_N(f) \text{ vérifie } \sup_{N \in \mathbb{N}} c_N^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N < +\infty\}.$$

Si $h \in H$, alors

$$\|h\|_H^2 = \lim_{N \rightarrow +\infty} \|\pi_N(h)\|_{H_N}^2 = \lim_{N \rightarrow +\infty} c_N(h)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h) = \sup_{N \in \mathbb{N}} c_N(h)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h).$$

Pour démontrer ce théorème, on a besoin du résultat suivant :

Lemme 7. Soit $B := \begin{pmatrix} A & \mathbf{a} \\ \mathbf{a}^\top & \alpha \end{pmatrix}$ une matrice réelle par blocs où A est une matrice de taille $N \times N$, \mathbf{a} est un vecteur de \mathbb{R}^N et α un réel. Supposons B symétrique définie positive. Soit $\mathbf{y} = (\mathbf{x}^\top, y_{N+1})^\top \in \mathbb{R}^{N+1}$ où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ et $y_{N+1} \in \mathbb{R}$. Alors,

$$\mathbf{y}^\top B^{-1} \mathbf{y} \geq \mathbf{x}^\top A^{-1} \mathbf{x}. \quad (7.2)$$

Preuve du Lemme 7. Écrivons tout d'abord, $\mathbf{y} = B\mathbf{v}$ avec $\mathbf{v} = B^{-1}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ v_{N+1} \end{pmatrix}$, où $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ et $v_{N+1} \in \mathbb{R}$. Un calcul par blocs conduit à

$$\mathbf{x} = A\mathbf{u} + v_{N+1}\mathbf{a} \quad \text{et} \quad y_{N+1} = \mathbf{a}^\top \mathbf{u} + \alpha v_{N+1}.$$

Puis,

$$\mathbf{y}^\top B^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{v}^\top B \mathbf{v} = \mathbf{u}^\top A \mathbf{u} + 2v_{N+1} \mathbf{a}^\top \mathbf{u} + \alpha v_{N+1}^2,$$

et

$$\mathbf{x}^\top A^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{u}^\top A \mathbf{u} + 2v_{N+1} \mathbf{a}^\top \mathbf{u} + v_{N+1}^2 \mathbf{a}^\top A^{-1} \mathbf{a}.$$

En comparant les deux expressions de $\mathbf{y}^\top B^{-1} \mathbf{y}$ et $\mathbf{x}^\top A^{-1} \mathbf{x}$, il suffit de montrer l'inégalité suivante : $\alpha \geq \mathbf{a}^\top A^{-1} \mathbf{a}$. On considère le vecteur $\mathbf{z} = \begin{pmatrix} A^{-1} \mathbf{a} \\ -1 \end{pmatrix}$. Comme B est une matrice positive, $\mathbf{z}^\top B \mathbf{z} = \mathbf{a}^\top A^{-1} \mathbf{a} - 2\mathbf{a}^\top A^{-1} \mathbf{a} + \alpha = \alpha - \mathbf{a}^\top A^{-1} \mathbf{a} \geq 0$, ce qui termine la preuve du lemme. □

Preuve du Théorème 11. Quitte à ré-indexer les points de la subdivision $\Delta_{N+1} = \{t_{N+1,j}, j = 0, \dots, N+1\}$, on peut supposer Γ^{N+1} de la forme $\begin{pmatrix} \Gamma^N & \mathbf{a}_N \\ \mathbf{a}_N^\top & \alpha_N \end{pmatrix}$.

CHAPITRE 7. CORRESPONDANCE ENTRE KRIGEAGE ET SPLINES DANS LE
CAS DE CONTRAINTES LINÉAIRES DE TYPE INÉGALITÉ

Alors $c_{N+1}(f)^\top$ est de la forme $(c_N(f)^\top, f_{N+1})$ et l'application du Lemme 7 donne $c_{N+1}(f)^\top (\Gamma^{N+1})^{-1} c_{N+1}(f) \geq c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f)$. Donc,

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f) = \sup_{N \in \mathbb{N}} c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f) \in [0, +\infty].$$

Soient $h \in H$ et h_N la projection orthogonale de h sur l'espace $\text{Vect} \{K(\cdot, t_{N,i}), i = 0, \dots, N\}$ dans H . Alors

$$h_N = \sum_{i=0}^N \beta_{N,i} K(\cdot, t_{N,i}),$$

où $\beta_N = (\beta_{N,0}, \dots, \beta_{N,N})^\top$ est la solution du système linéaire $(\Gamma^N) \beta_N = c_N(h)$. Par suite, $\beta_N = (\Gamma^N)^{-1} c_N(h)$ et $\|h_N\|_H^2 = c_N(h)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h)$. Considérons

$$F = \text{Vect} \{K(\cdot, t_{N,i}), i = 0, \dots, N \text{ et } N \geq 1\}.$$

Alors F est un sous-espace dense dans H car si $g \in F^\perp$,

$$(g, K(\cdot, t_{N,i}))_H = g(t_{N,i}) = 0, \quad i = 0, \dots, N.$$

Par continuité, $g = 0$ et $F^\perp = \{0\}$. Puisque F est dense dans H , on en déduit que

$$h_N \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} h \text{ dans } H,$$

et donc $\|h_N\|_H^2 = c_N(h)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \|h\|_H^2$.

Il nous reste à démontrer pour $f \in E$ que

$$M = \sup_{N \geq 1} c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f) < +\infty \Rightarrow f \in H.$$

Soit $h_N = \sum_{j=0}^N \beta_{N,j} K(\cdot, t_{N,j})$, où $\beta_N = (\Gamma^N)^{-1} c_N(f)$. Alors, $h_N \in H$ et

$$\|h_N\|_H^2 = c_N(f)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(f) \leq M < +\infty.$$

Donc, $(h_N)_{N \in \mathbb{N}}$ est une suite bornée dans l'espace de Hilbert H . Par compacité faible dans H , il existe $(h_{N_k})_k$ telle que $h_{N_k} \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} h_\infty \in H$ (convergence faible).

En particulier, $h_{N_k}(x) = (h_{N_k}, K(\cdot, x))_H \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} h_\infty(x)$. Soit $\{u_0, u_1, u_2, \dots\} := \{t_{N,j}, j = 0, \dots, N \text{ et } N \geq 1\}$. Pour tout $i \geq 1$ (fixé), on a

$$f(u_i) = h_{N_k}(u_i), \quad \text{pour } k \text{ assez grand.}$$

Donc, $f(u_i) = h_\infty(u_i)$ pour tout i et $f = h_\infty \in H$ par continuité et densité de l'ensemble des nœuds dans X .

□

7.4. LE RÉSULTAT PRINCIPAL

Corollaire 4. *Pour tout h dans H_{N+1} , on a $\|\pi_N(h)\|_{H_N} \leq \|h\|_{H_{N+1}}$.*

Preuve. C'est une conséquence directe du Théorème 11 puisque

$$\begin{aligned}\|\pi_N(h)\|_{H_N}^2 &= c_N(h)^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h), \\ \|h\|_{H_{N+1}}^2 &= c_{N+1}(h)^\top (\Gamma^{N+1})^{-1} c_{N+1}(h).\end{aligned}$$

□

Maintenant, nous pouvons aborder le résultat principal de ce chapitre.

Supposons $H \cap C \cap I \neq \emptyset$, on rappelle que la spline d'interpolation sous contraintes h_{opt} est la solution unique du problème d'optimisation suivant :

$$\arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2.$$

Dans les cas classiques où C représente l'espace des fonctions vérifiant des contraintes de borne, monotonie ou convexité (voir la Section 7.2), on a

$$\forall N \geq 1, \quad \pi_N(C) \subset C.$$

On remarquera qu'il s'agit de l'hypothèse (H2) du Chapitre 6. Supposons maintenant pour simplifier que

$$\{x_i, i = 1, \dots, n\} \subset \{t_{N,j}, j = 0, \dots, N\} \quad \text{pour } N \text{ assez grand.}$$

On en conclut que $H_N \cap C \cap I \neq \emptyset$ pour N suffisamment grand². Cette hypothèse n'est pas nécessaire, on se reportera au Chapitre 6 (et l'hypothèse technique (H1)) pour une preuve sans cette hypothèse du théorème suivant :

Théorème 12 (Correspondance entre krigeage et splines sous contraintes). *Supposons $H \cap C \cap I \neq \emptyset$ et $\pi_N(C) \subset C$ pour tout $N \geq 1$. Soit \hat{y}_N l'estimateur MAP :*

$$\hat{y}_N = \arg \min_{h \in H_N} L_{pos}^N(h) = \arg \min_{h \in H_N \cap C \cap I} \|h\|_{H_N}^2,$$

où L_{pos}^N est la vraisemblance a posteriori du processus gaussien Y^N sachant $Y^N(x_i) = y_i$, $i = 1, \dots, n$ et $Y^N \in C$. Alors,

$$\hat{y}_N \xrightarrow[N \rightarrow +\infty]{} h_{opt} \quad \text{dans } E = C^0(X) \quad (\text{convergence uniforme}),$$

où h_{opt} est la spline d'interpolation sous contraintes :

$$h_{opt} = \arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2.$$

2. Pour tout $h \in H \cap C \cap I$, $\pi_N(h) \in H_N \cap C \cap I$ pour N assez grand.

Commentaires. $\hat{y} := \lim_N \hat{y}_N = h_{opt}$ peut être interprétée comme la fonction la plus vraisemblable parmi les fonctions y de C qui vérifient $y(x_i) = y_i$, $i = 1, \dots, n$. Le Théorème 12 montre que cet estimateur bayésien est indépendant du choix de la subdivision $\{t_{N,j}\}$ et qu'il est lisse ou régulier puisque $\hat{y} = h_{opt} \in H$. Dans l'autre sens, la spline d'interpolation sous contraintes admet une interprétation probabiliste comme estimateur bayésien, à la condition de considérer le 'mode *a posteriori*' (MAP) et non pas la moyenne *a posteriori*.

Preuve du Théorème 12. Écrivons

$$h_{opt,N} - h_{opt} = h_{opt,N} - \pi_N(h_{opt}) + \pi_N(h_{opt}) - h_{opt},$$

où

$$h_{opt,N} := \hat{y}_N = \arg \min_{h \in H_N \cap C \cap I} \|h\|_{H_N}^2.$$

On sait (cf. Chapitre 6, Section 6.3.1) que

$$\|\pi_N(h_{opt}) - h_{opt}\|_E \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0.$$

La preuve du théorème est une conséquence directe des deux lemmes suivants.

Lemme 8. $\forall h \in H_N$, $\|h\|_E \leq c \|h\|_{H_N}$, où c est une constante indépendante de N .

Lemme 9. $\|h_{opt,N} - \pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0$.

□

Preuve du Lemme 8. Pour $x \in X$ et $h \in H_N$, on a

$$|h(x)| = |(h, K_N(\cdot, x))_{H_N}| \leq \|h\|_{H_N} \times \sqrt{K_N(x, x)},$$

où $K_N(x, x) = \sum_{i,j=0}^N K(t_{N,i}, t_{N,j}) \phi_{N,i}(x) \phi_{N,j}(x)$. Comme $\sum_{i,j=0}^N \phi_{N,i}(x) \phi_{N,j}(x) = 1$, on obtient

$$0 \leq \sup_{x \in X} K_N(x, x) \leq M = \max_{x, x' \in X} |K(x, x')|,$$

ce qui prouve le Lemme 8 avec $c = \sqrt{M}$.

□

Preuve du Lemme 9. On a

$$\|h_{opt,N} - \pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 = \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 + \|\pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 - 2(h_{opt,N}, \pi_N(h_{opt}))_{H_N}.$$

Or, $h_{opt,N}$ est la projection du vecteur nul sur l'espace convexe $H_N \cap C \cap I$ et $\pi_N(h_{opt}) \in H_N \cap C \cap I$ (si N assez grand). Par propriété de la projection sur un espace convexe dans un espace de Hilbert, on a

$$(0 - h_{opt,N}, \pi_N(h_{opt}) - h_{opt,N})_{H_N} \leq 0,$$

7.4. LE RÉSULTAT PRINCIPAL

i.e. $\|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq (h_{opt,N}, \pi_N(h_{opt}))_{H_N}$. Par suite,

$$\|h_{opt,N} - \pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 \leq \|\pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 - \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2. \quad (7.3)$$

Par le Théorème 11, on sait que

$$\|\pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2 \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \|h_{opt}\|_H^2.$$

Ainsi, il suffit de prouver que

$$\|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 = \min_{h \in H_N \cap C \cap I} \|h\|_{H_N}^2 \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \|h_{opt}\|_H^2 = \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2.$$

L'inégalité (7.3) implique

$$\|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|\pi_N(h_{opt})\|_{H_N}^2,$$

donc $\limsup_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|h_{opt}\|_H^2$. Comme $\pi_N(h_{opt,N+1}) \in H_N \cap I \cap C$ (si N assez grand), on a

$$\|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|\pi_N(h_{opt,N+1})\|_{H_N}^2$$

et le Corollaire 4 implique

$$\|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|h_{opt,N+1}\|_{H_{N+1}}^2.$$

Il résulte de tout cela que

$$\limsup_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 = \lim_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|h_{opt}\|_H^2.$$

Pour $N \geq 1$, on note h_N la fonction de norme minimale dans H telle que

$$h_N(t_{N,j}) = h_{opt,N}(t_{N,j}), \quad 0 \leq j \leq N.$$

On a encore (cf. Chapitre 2) :

$$h_N = \sum_{j=0}^N \lambda_j K(\cdot, t_{N,j}),$$

avec $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N)^\top = (\Gamma^N)^{-1} c_N(h_{opt,N})$. De plus,

$$\|h_N\|_H^2 = c_N(h_{opt,N})^\top (\Gamma^N)^{-1} c_N(h_{opt,N}) = \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2$$

en vertu de la Proposition 14. Donc, $\lim_N \|h_N\|_H^2 = \lim_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 \leq \|h_{opt}\|_H^2$. La suite $(h_N)_N$ est bornée dans H . Par compacité faible, il existe une sous-suite $(h_{N_k})_k$ telle que $h_{N_k} \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} h_\infty \in H$. Soit $\{u_0, u_1, \dots\} := \{t_{N,j}, j = 0, \dots, N, N \geq 1\}$ l'ensemble de tous

les points de subdivision.

Pour k suffisamment grand, $h_{opt,N_k}(u_j) = h_{N_k}(u_j) = (h_{N_k}, K(\cdot, u_j))_H$, donc $h_{opt,N_k}(u_j) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} h_\infty(u_j)$ par convergence faible.

En particulier, $M \geq 1$ étant un entier fixé, on a

$$\pi_M(h_{opt,N_k}) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} \pi_M(h_\infty).$$

Ainsi, $\pi_M(h_\infty) \in C$ comme $H_M \cap C$ est fermé dans H_M (C est un fermé de E et toutes les topologies d'espace normé sont équivalentes sur H_M de dimension finie). Maintenant, $\pi_M(h_\infty) \xrightarrow{M \rightarrow +\infty} h_\infty$, et $h_\infty \in C$ car C est fermé dans $E = \mathcal{C}^0(X)$. Par convergence faible de h_{N_k} vers h_∞ , on a

$$\|h_\infty\|_H^2 \leq \liminf_k \|h_{N_k}\|_H^2 = \lim_k \|h_{opt,N_k}\|_{H_{N_k}}^2 \leq \|h_{opt}\|_H^2.$$

Puisque $h_\infty \in H \cap C \cap I$, on a aussi $\|h_{opt}\|_H^2 \leq \|h_\infty\|_H^2$ et donc $\lim_k \|h_{opt,N_k}\|_{H_{N_k}}^2 = \|h_{opt}\|_H^2$. De là, $\lim_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 = \limsup_N \|h_{opt,N}\|_{H_N}^2 = \|h_{opt}\|_H^2$, ce qui termine la preuve du théorème. \square

7.5 Illustration numérique

On s'intéresse au cas où la vraie fonction f prend ses valeurs entre deux réelles a et b . Dans ce cas, l'espace convexe C est égal à :

$$C = \{f \in \mathcal{C}^0([0, 1]) : a \leq f(x) \leq b, x \in [0, 1]\}.$$

Supposons que f soit évaluée en $n = 4$ points d'observation (points noirs sur la Figure 48). Sur la Figure 48a, le noyau gaussien est utilisé avec les hyper-paramètres $(\sigma^2, \theta) = (225, 0.2)$ et $[a, b] = [-20, 20]$. On fixe $N = 50$ et on représente les fonctions suivantes : la moyenne de krigeage sans contraintes (voir Section 7.2), la moyenne de krigeage avec contraintes (voir Chapitre 3, Définition 4) et le mode du processus gaussien conditionnellement borné entre -20 et +20 (voir Chapitre 3, Définition 5). Remarquons tout d'abord que la moyenne de krigeage sans contraintes (courbe en bleu) ne respecte pas les contraintes inégalité contrairement à la moyenne de krigeage bornée (moyenne des simulations) et le mode. Sur la Figure 48b, on utilise toujours le noyau gaussien avec les mêmes paramètres de covariance. La seule différence avec la Figure 48a est qu'on relâche les contraintes de borne de sorte que la moyenne de krigeage sans contraintes respecte les contraintes inégalité. Dans ce cas là, les bornes sont fixées à $[a, b] = [-30, 30]$. Remarquons que la moyenne de krigeage usuelle coïncide avec le mode et pas avec la moyenne de

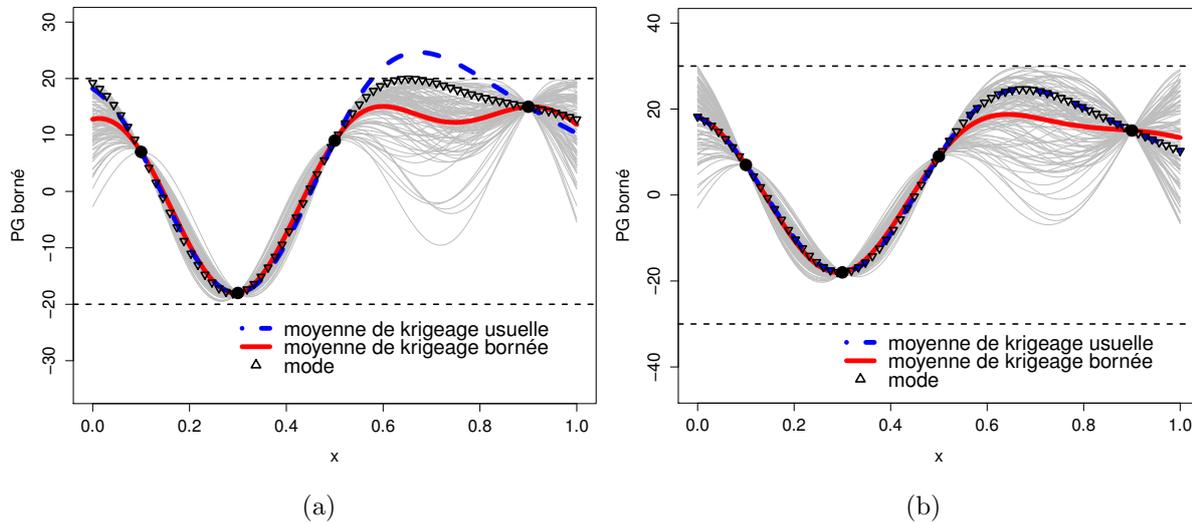


FIGURE 48 – La moyenne de krigeage sans et avec contraintes inégalité et le mode en utilisant le noyau gaussien. Les contraintes de borne sont respectivement $[-20, 20]$ et $[-30, 30]$ (Figure 48a et Figure 48b).

krigeage bornée. Cela est conforme au fait que le mode du processus gaussien conditionnel (pour $N = +\infty$) est bien la spline d'interpolation contrainte.

Sur la Figure 49, on relâche les contraintes de borne de sorte qu'elles n'aient plus d'influence sur les simulations. Dans ce cas, les deux bornes inférieure et supérieure sont fixées à $[-30, 60]$. Remarquons que la moyenne de krigeage usuelle, la moyenne de krigeage bornée et le mode coïncident. Cela correspond au krigeage sans contraintes inégalité où moyenne, mode et spline d'interpolation sont confondus.

7.6 Conclusion

Dans ce chapitre, la correspondance entre les deux approches décrites au Chapitre 2 pour résoudre un problème d'interpolation sous contraintes a été établie dans le cas de contraintes linéaires de type inégalité. D'une part, une approche déterministe conduit à résoudre un problème d'optimisation sous contraintes (conditions d'interpolation et contraintes inégalité) dans un espace de Hilbert à noyau reproduisant. D'autre part, une approche probabiliste considère le problème d'interpolation comme un problème d'estimation d'une fonction dans un cadre bayésien. Dans le cas où le processus gaussien initial est de dimension finie (ou le RKHS de dimension finie), le lien entre le mode du processus gaussien conditionnel et la spline d'interpolation sous contraintes a été établi sans difficulté. Dans le cas de la dimension infinie, on a montré que le mode peut être défini grâce à

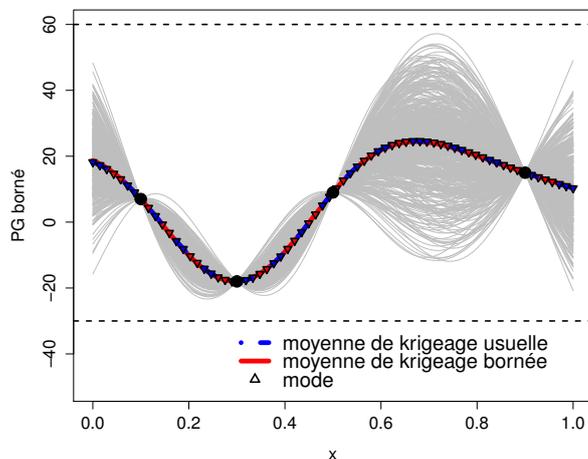


FIGURE 49 – 1000 simulations d’un processus gaussien (trajectoires en gris) conditionnellement bornées entre $[-30, 60]$ sur le domaine $[0, 1]$. La moyenne de krigeage usuelle, la moyenne de krigeage bornée et le mode coïncident.

une suite d’approximations de dimension finie du PG initial (ou de la mesure gaussienne initiale). De plus, cette fonction mode (ou MAP) est précisément la spline d’interpolation contrainte de l’approche déterministe (lorsque le noyau reproduisant du RKHS est égal à la fonction de covariance du PG). Ce résultat est vu comme une généralisation du lien déjà établi entre la régression par processus gaussien et l’interpolation optimale dans un RKHS (splines), voir Chapitre 2.

7.6. CONCLUSION

Cinquième partie

**Application réelle en assurance et
finance : estimation d'une courbe
d'actualisation et de probabilités de
défaut**

Chapitre 8

Estimation de la courbe d'actualisation et de probabilités de défaut par krigeage sous contraintes

Sommaire

8.1	Introduction	165
8.2	Interpolation sous contraintes linéaires	166
8.3	Modèle d'interpolation monotone	167
8.4	Cas de la dimension 1	167
8.4.1	Simulation des trajectoires	167
8.4.2	Courbe la plus probable	168
8.5	Cas de la dimension 2	169
8.6	Estimation des paramètres de covariance	170
8.6.1	Paramètre de portée	170
8.6.2	Paramètre d'échelle	170
8.7	Étude empirique	170
8.7.1	Euribor data	171
8.7.2	Overnight Indexed Swaps (OIS) discount curve	176
8.7.3	Credit Default Swaps (CDS) data	180
8.8	Conclusion	183

8.1 Introduction

La construction de Structures par Terme est au coeur de l'évaluation financière et de la gestion du risque. Une structure par terme est une courbe qui décrit l'évolution d'une

grandeur économique ou financière comme une fonction de la maturité ou horizon de temps. Des exemples typiques sont la structure par terme des taux d'intérêt sans risque, la structure par terme d'obligations, la structure par terme de probabilités de défaut et la structure par terme de volatilités implicites de rendements d'actifs financiers. En pratique, les cotations des marchés des produits financiers sous-jacents sont utilisées et fournissent une information partielle sur les structures par terme considérées. De plus, cette information est plus au moins fiable en fonction de la liquidité de la maturité des marchés en question. Le problème est d'obtenir une courbe continue en la maturité à partir de ces informations.

Parmi les différentes approches de ce problème, on pourra consulter [Nelson and Siegel, 1987], [Smith and Wilson, 2001], [Hagan and West, 2006], [Andersen, 2007], [Ametrano and Bianchetti, 2009], [Chibane et al., 2009], [Kenyon and Stamm, 2012], [Fries, 2013], [Le Floc'h, 2013] et [Iwashita, 2013].

Ce chapitre est organisé de la manière suivante : dans la Section 8.2, on présente le cas des contraintes linéaires de type égalité quelconque. Dans la Section 8.3, on rappelle le modèle décrit dans le Chapitre 3 pour intégrer les contraintes de monotonie. Ensuite, on étudie l'estimation des paramètres de covariance. Quelques exemples numériques pour estimer les facteurs d'actualisation en dimension 1 et 2 sont inclus dans la Section 8.7.

8.2 Interpolation sous contraintes linéaires

Dans ce chapitre, on considère le cas où la vraie fonction f vérifie des contraintes linéaires de type égalité de la forme suivante :

$$A \cdot f(\mathbf{X}) = \mathbf{b}, \quad f(\mathbf{X}) = (f(x^{(1)}), \dots, f(x^{(n)}))^{\top}, \quad (8.1)$$

où A est une matrice de dimension $m \times n$, $m, n \geq 1$ et où $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ (A est supposée de rang m). Ce type de contraintes généralise les contraintes d'interpolation étudiées jusqu'ici. Dans le cadre de la Régression par Processus Gaussien, on considère Y un PG de moyenne μ et de fonction de covariance K . La loi conditionnelle de Y sachant (8.1) est :

$$Y(\mathbf{x}) \mid A \cdot Y(\mathbf{X}) = \mathbf{b} \sim \mathcal{N}(\eta(\mathbf{x}), \tau^2(\mathbf{x})),$$

où

$$\begin{cases} \eta(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + (A\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{\top} (AKA^{\top})^{-1} (\mathbf{b} - A\boldsymbol{\mu}) \\ \tau^2(\mathbf{x}) = K(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (A\mathbf{k}(\mathbf{x}))^{\top} (AKA^{\top})^{-1} A\mathbf{k}(\mathbf{x}) \end{cases}$$

avec $\boldsymbol{\mu} = \mu(\mathbf{X}) = (\mu(x^{(1)}), \dots, \mu(x^{(n)}))^{\top} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{k}(\mathbf{x})$ le vecteur de covariance entre $Y(\mathbf{x})$ et $Y(\mathbf{X})$ et K la matrice de covariance de $Y(\mathbf{X})$. Notons que dans le cas où A est une matrice identité, les contraintes linéaires sont des conditions d'interpolation usuelle.

8.3 Modèle d'interpolation monotone

Dans l'application envisagée dans ce chapitre, la vraie fonction est une courbe d'actualisation ou une probabilité de défaut. Comme fonction de la maturité (T), elle est *a priori* décroissante, de valeur égale à 1 en $T = 0$ et qui tend vers 0 avec T . On propose de mettre en œuvre le modèle d'interpolation sous contraintes développé au Chapitre 3.

8.4 Cas de la dimension 1

Dans cette section, la variable x est supposée dans $[0, 1]$ et le PG Y centré ($\mu = 0$). On utilise l'approximation suivante (cf. Chapitre 3, Section 3.3.2) :

$$Y^N(x) = Y(0) + \sum_{j=0}^N Y'(u_j) \phi_j(x) = \eta + \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(x), \quad (8.2)$$

où $\boldsymbol{\xi} = (\eta, \xi_0, \dots, \xi_N)^\top \in \mathbb{R}^{N+2}$ est un vecteur gaussien centré de matrice de covariance Γ^N et où $(\phi_j)_{0 \leq j \leq N}$ sont déterministes :

$$\phi_j(x) = \int_0^x h_j(u) du, \quad x \in [0, 1],$$

où $h_j(x) = h\left(\frac{x-u_j}{\delta}\right) := \left(1 - \frac{|x-u_j|}{\delta}\right) \mathbb{1}_{\frac{|x-u_j|}{\delta} \leq 1}$ est la fonction chapeau centrée sur le $j^{\text{ème}}$ nœud $u_j := j\delta$, $j = 0, \dots, N$, de la subdivision uniforme de pas $\delta = 1/N$. Dans ce cas, la monotonie décroissante du processus gaussien Y^N est *équivalente* à la négativité de tous les coefficients ξ_j , $j = 0, \dots, N$ (cf. Chapitre 3, Proposition 2). De plus, la matrice de covariance Γ^N du vecteur gaussien $\boldsymbol{\xi}$ peut s'écrire sous la forme :

$$\Gamma^N = \begin{bmatrix} K(0, 0) & \frac{\partial K}{\partial x'}(0, u_j) \\ \frac{\partial K}{\partial x}(u_i, 0) & \frac{\partial^2 K}{\partial x \partial x'}(u_i, u_j) \end{bmatrix}_{0 \leq i, j \leq N},$$

où $K = \sigma^2 C_\theta$ est la fonction de covariance du processus initial Y , avec σ un paramètre d'échelle, C_θ la fonction de corrélation où θ un paramètre de portée.

8.4.1 Simulation des trajectoires

En appliquant les conditions linéaires définies dans (8.1) au modèle proposé $Y^N(x)$ (voir (8.2)), on obtient :

$$A \cdot Y^N(\mathbf{X}) = A \cdot \left(\eta + \sum_{j=0}^N \xi_j \phi_j(\mathbf{X}) \right) = (A \cdot H) \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}, \quad (8.3)$$

où la matrice H de taille $m \times (N + 2)$ est définie par :

$$H_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{pour } i = 1, \dots, n \text{ et } j = 1, \\ \phi_{j-2}(x^{(i)}) & \text{pour } i = 1, \dots, n \text{ et } j = 2, \dots, N + 2. \end{cases}$$

Alors, la simulation du processus gaussien conditionnel sous contraintes de monotonie (décroissante) équivaut à simuler un vecteur gaussien $\boldsymbol{\xi}$ tronqué à l'espace correspondant aux conditions linéaires de type égalité et aux contraintes de monotonie suivantes :

$$\begin{cases} (A \cdot H) \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{b} & \text{conditions linéaires de type égalité} \\ \boldsymbol{\xi} \in C_\xi & \text{contraintes de monotonie} \end{cases}$$

où $C_\xi = \{\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{N+2} : \xi_j \leq 0, j = 0, \dots, N\}$.

8.4.2 Courbe la plus probable

En utilisant le modèle défini dans (8.2), l'estimateur (MAP) défini dans Chapitre 3, Définition 5 est égal à :

$$M_K(x | A, \mathbf{b}) = \nu + \sum_{j=0}^N \nu_j \phi_j(x), \quad (8.4)$$

où $\boldsymbol{\nu} = (\nu, \nu_0, \dots, \nu_N)^\top \in \mathbb{R}^{N+2}$ est la solution du problème d'optimisation quadratique suivant :

$$\boldsymbol{\nu} = \arg \min_{c \in I_\xi \cap C_\xi} \left(\frac{1}{2} c^\top (\Gamma^N)^{-1} c \right),$$

avec Γ^N la matrice de covariance du vecteur gaussien $\boldsymbol{\xi}$. Le vecteur $\boldsymbol{\nu}$ est vu comme le mode du vecteur gaussien $\boldsymbol{\xi}$ tronqué à $I_\xi \cap C_\xi$, où I_ξ représente les conditions linéaires de type égalité $(A \cdot H) \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}$.

L'avantage d'un tel estimateur est de vérifier à la fois les conditions linéaires de type égalité définies dans (8.3) et la monotonie décroissante. De plus, il ne dépend pas du paramètre de variance (cf. Chapitre 3). Pour $N = +\infty$, c'est aussi la fonction spline d'interpolation sous contraintes défini par (cf. Chapitre 6) :

$$h_{opt} = \arg \min_{h \in H \cap C \cap I} \|h\|_H^2,$$

où H est le RKHS associé au noyau de covariance K , C est l'espace des fonctions décroissantes et $I = \{f : A \cdot f(\mathbf{X}) = \mathbf{b}\}$.

8.5 Cas de la dimension 2

Dans cette section, les variables d'entrée sont la maturité x et le temps t (date de cotation en année). La vraie fonction est supposée monotone (décroissante) par rapport à la première variable x seulement :

$$\forall t, \quad x \leq x' \quad \Rightarrow \quad f(x', t) \leq f(x, t).$$

On utilise le modèle d'approximation suivant (voir Chapitre 3, Section 3.4) :

$$Y^N(x, t) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_t} \xi_{i,j} h_i(x) g_j(t) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_t} Y(u_i, u_j) h_i(x) g_j(t), \quad (8.5)$$

où $h_i(x) = \max(1 - \frac{|x-u_i|}{\delta_x})$ et où $g_j(t) = \max(1 - \frac{|t-v_j|}{\delta_t})$ sont les fonctions chapeau centrés aux nœuds $u_i = u_0 + \delta_x i$ et $v_j = v_0 + \delta_t j$ de la subdivision de l'espace d'entrée associé (les pas de discrétisation δ_x et δ_t peuvent être différents ici).

La matrice de covariance $\Gamma^N \in \mathbb{R}^{((N_x+1) \cdot (N_t+1))^2}$ est égale à

$$\Gamma_{(i,j),(i',j')}^N = \text{Cov}(\xi_{i,j}, \xi_{i',j'}) = \text{Cov}(Y(u_i, v_j), Y(u_{i'}, v_{j'})),$$

où $i, i' = 0, \dots, N_x$ et où $j, j' = 0, \dots, N_t$.

Les contraintes linéaires de type égalité sont de la forme :

$$A_t \cdot Y^N(\mathbf{X}, t) = \mathbf{b}_t, \quad t = t^{(1)}, \dots, t^{(T)}.$$

La monotonie (décroissante) sur Y^N par rapport à la première variable est *équivalente* aux contraintes linéaires suivantes sur les coefficients :

$$\xi_{i,j} \leq \xi_{i-1,j}, \quad i = 1, \dots, N_x \text{ et } j = 0, \dots, N_t. \quad (8.6)$$

Par suite, la simulation du processus gaussien conditionnel sous contraintes de monotonie par rapport à la première variable revient à simuler le vecteur gaussien $(\xi_{i,j})_{i,j}$ tronqué à

$$\begin{cases} (A_t \cdot H_t) \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{b}_t, & t = t^{(1)}, \dots, t^{(T)} & \text{conditions linéaires} \\ \boldsymbol{\xi} \in C_\xi & & \text{contraintes de monotonie} \end{cases}$$

où $C_\xi = \left\{ \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{((N_x+1)(N_t+1))^2} : \xi_{i-1,j} \leq \xi_{i,j} \right\}$. La matrice H_t admet les composantes $(H_t)_{k,l_{ij}} = h_i(x^{(k)}) g_j(t)$, où $l_{ij} = (N_t+1)i + j + 1$, $i = 0, \dots, N_x$ et $j = 0, \dots, N_t$. Le vecteur colonne $\boldsymbol{\xi} = (\xi_{0,0}, \xi_{0,1}, \dots, \xi_{i,j}, \dots, \xi_{N_x, N_t})^\top$ admet les composantes $(\boldsymbol{\xi})_{l_{ij}} = \xi_{i,j}$. La matrice H_t est de taille $n \times N_{tot}$ et le vecteur colonne $\boldsymbol{\xi}$ est de taille N_{tot} , où $N_{tot} = (N_x+1) \cdot (N_t+1)$.

8.6 Estimation des paramètres de covariance

Dans cette section, l'estimation des hyper-paramètres de covariance du processus gaussien initial Y est considéré. On reprend la méthode de validation croisée adaptée aux contraintes de type inégalité du Chapitre 5.

8.6.1 Paramètre de portée

On rappelle que le critère LOO adapté aux contraintes inégalité s'écrit :

$$\hat{\theta}_{VCA} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - M_{K_\theta}(y_i | \mathbf{y}_{-i}))^2, \quad (8.7)$$

avec M_{K_θ} la fonction mode qui ne dépend pas du paramètre d'échelle σ . Ce critère ne peut pas être appliqué directement car les contraintes linéaire de type égalité ne sont pas de simples conditions d'interpolation. On reformule le critère EQM empirique de la manière suivante :

$$\hat{\theta}_{VCA} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (b_i - (A \cdot M_{K_\theta}(y_i | A_{-i}, \mathbf{b}_{-i}))_i)^2, \quad (8.8)$$

où A_{-i} et \mathbf{b}_{-i} sont respectivement la matrice A et le vecteur \mathbf{b} sans la $i^{\text{ème}}$ ligne et où $M_{K_\theta}(y_i | A_{-i}, \mathbf{b}_{-i})$ est défini par (8.4).

8.6.2 Paramètre d'échelle

Le paramètre σ^2 est estimé par l'équation suivante :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(b_i - (A \cdot M_{K_\theta}(y_i | A_{-i}, \mathbf{b}_{-i}))_i)^2}{\mathbb{E}((AY(X) - A \cdot M_{K_\theta}(X | A_{-i}, \mathbf{b}_{-i}))^2 | \mathcal{D}_i)} = 1, \quad (8.9)$$

ou \mathcal{D}_i traduit la monotonie et les contraintes égalité sans la $i^{\text{ème}}$ information.

8.7 Étude empirique

Le modèle proposé dans la Section 8.4 et la Section 8.5 a été appliqué à des données réelles.

8.7.1 Euribor data

Les données. La fonction à estimer est définie sur l'intervalle $[0, 40]$ de maturités exprimées en années. Elle démarre de 1 et décroît vers zéro à l'infini. En notant $\mathbf{X} = (1, \dots, 40)^\top$ (de taille 40), les conditions linéaires de type égalité sont définies par une matrice réelle A de taille 14×40 :

$$A \cdot Y^N(\mathbf{X}) = \mathbf{b}, \quad (8.10)$$

où $\mathbf{b} = (1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^{14}$. Dans ce cas, on a $m = 14$ et $n = 40$. En tenant compte du fait que le taux d'actualisation démarre de 1, l'ensemble des contraintes linéaires de type égalité est :

$$\begin{pmatrix} 1 & \phi_0(0) & \dots & \phi_N(0) \\ & A \cdot H & & \end{pmatrix} \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

Dans ce cas, la simulation du processus gaussien Y^N conditionnellement à (8.11) et à la contrainte de monotonie (décroissante) est *équivalente* à simuler le vecteur gaussien $\boldsymbol{\xi}$ tronqué au sous-espace convexe $I_\xi \cap C_\xi$ où I_ξ est donnée par l'équation (8.11) et $C_\xi := \{\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{N+2} : \xi_j \leq 0, j = 0, \dots, N\}$.

Estimation des paramètres. Dans cette section, deux noyaux de covariance sont utilisées (Matérn 5/2 et Matérn 3/2). Les hyper-paramètres associés σ^2 et θ sont estimés par la méthode de validation croisée adaptée aux contraintes. On dénote respectivement par $\hat{\theta}_{M_5}$ et $\hat{\theta}_{M_3}$ les paramètres de portée des noyaux Matérn 5/2 et Matérn 3/2. Dans la Table 8.1, le paramètre de portée $\hat{\theta}$ reste stable pour différentes dates de cotation en utilisant les deux noyaux de covariance Matérn 5/2 et 3/2 (proche de 30 pour $\hat{\theta}_{M_5}$ et de 40 pour $\hat{\theta}_{M_3}$). De plus, la moyenne des valeurs optimales du critère EQM empirique défini par l'équation (8.8) est légèrement plus faible pour $\hat{\theta}_{M_5}$.

Sur la Figure 50, on considère les données Swap versus Euribor 6M au 02/06/2010. La Figure 50a montre la fonction à optimiser en utilisant le noyau Matérn 5/2 comme fonction de covariance. La Figure 50b montre la même fonction en utilisant cette fois le noyau Matérn 3/2 comme fonction de covariance. L'EQM atteint la valeur maximale 0.008 pour le noyau Matérn 5/2 et prend des valeurs inférieures à 0.003 pour le noyau Matérn 3/2.

Sur la Figure 51, on choisit $N = 50$ et on simule le modèle (8.2) avec les contraintes de monotonie (décroissante). Pour mieux visualiser les courbes ainsi simulées, on ne tient pas compte de l'avant-dernière contrainte égalité qui correspond à la maturité de 30 années. Sur la Figure 51a (respectivement Figure 51b), le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé avec les paramètres $(\sigma^2, \hat{\theta}_{M_5}) = (1, 30.8)$ (resp. $(\sigma^2, \hat{\theta}_{M_3}) = (1, 47.9)$). Sur les deux figures, la courbe noire représente le mode du processus gaussien conditionnel

8.7. ÉTUDE EMPIRIQUE

TABLE 8.1 – L'estimation du paramètre de portée en utilisant la méthode de validation croisée adaptée (Swap versus Euribor 6M).

Date	$\hat{\theta}_{M_5}$	$\hat{\theta}_{M_3}$	Valeur optimale Matérn 5/2	Valeur optimale Matérn 3/2
02/06/2010	30.8	47.9	1.1e-06	6.4e-05
05/07/2010	25.2	40.5	1.1e-05	1.1e-04
03/08/2010	27.0	45.2	4.7e-06	8.8e-05
29/11/2010	39.9	47.0	2.3e-05	8.9e-05
30/12/2010	28.0	39.5	1.5e-06	9.1e-05
31/01/2011	29.2	40.0	1.2e-06	8.5e-05
10/05/2011	27.6	37.6	1.2e-06	7.0e-05
10/06/2011	30.7	36.51	2.8e-06	6.5e-05
30/12/2011	30.0	32.98	3.6e-06	1.6e-04

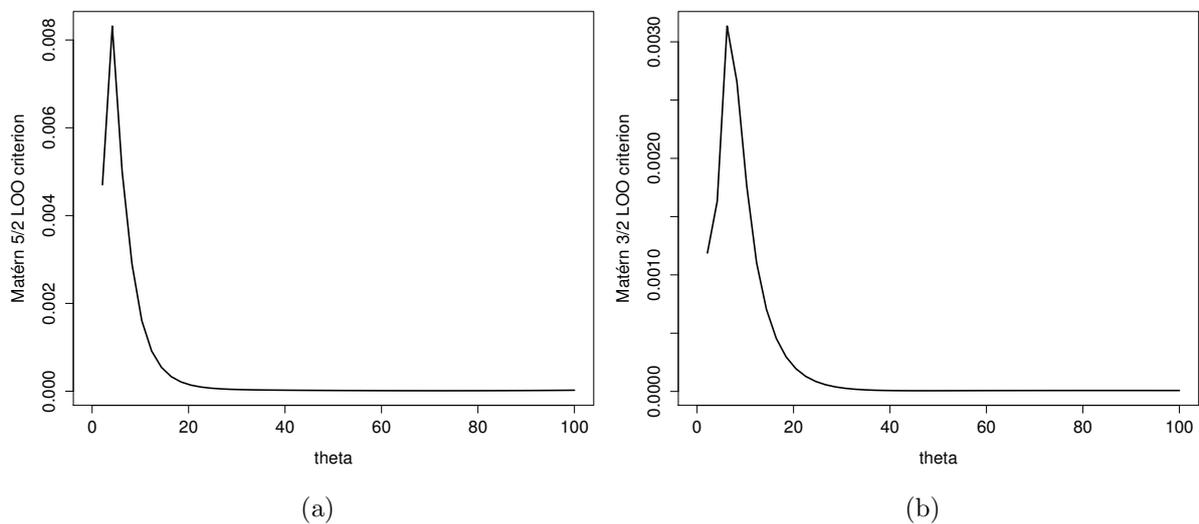


FIGURE 50 – La fonction à optimiser dans le critère LOO (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) comme fonction de covariance Figure 50a (resp. Figure 50b).

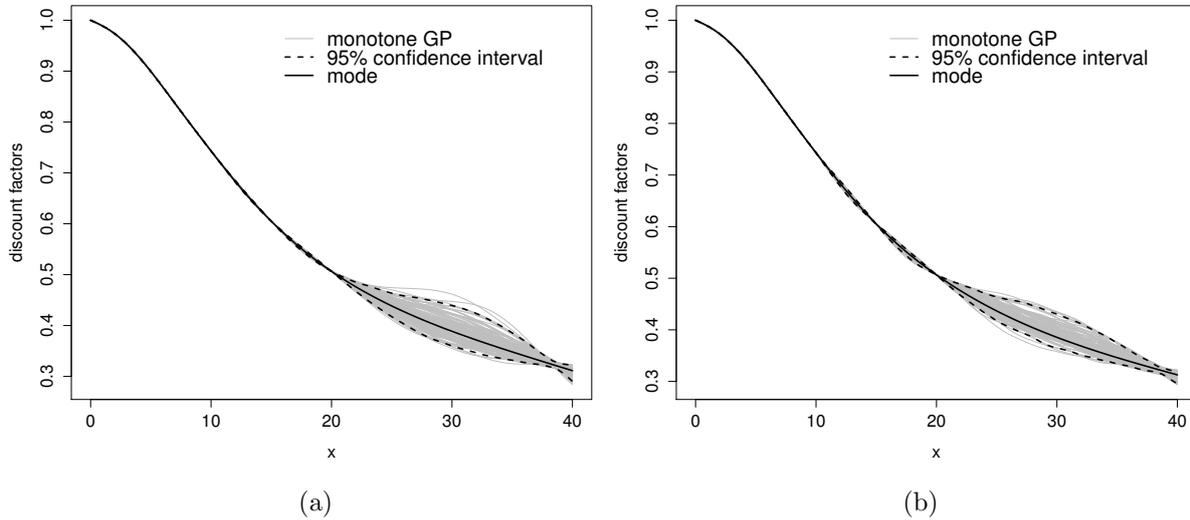


FIGURE 51 – Simulations d'un processus gaussien (trajectoires grises) conditionnellement monotone décroissant et sans tenir compte de l'avant-dernière contrainte égalité. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 51a (resp. Figure 51b).

sans tenir compte de l'avant-dernière contrainte égalité. Notons que cette courbe reste décroissante sur tout le domaine et qu'elle respecte les conditions linéaires définies par l'équation (8.3).

Simulations en dimension 1. On considère les données Euribor au 02/06/2010. Avec la Table 8.1, on voit que $\hat{\theta}_{M_5} = 30.8$ et $\hat{\theta}_{M_3} = 47.9$. Par l'équation (8.9), on obtient $\hat{\sigma}_{M_5} = 0.3$ qui correspond au paramètre de variance du noyau Matérn 5/2 et $\hat{\sigma}_{M_3} = 0.2$ pour le noyau Matérn 3/2.

Sur la Figure 52, on choisit $N = 50$ et on donne deux exemples numériques en simulant le processus gaussien conditionnellement monotone décroissante. Remarquons que sur les deux figures, les trajectoires simulées (courbes en gris) sont décroissantes sur le domaine tout entier. En réalité, les trajectoires sont plus régulières sur la Figure 52a que sur la Figure 52b. Cela est lié à la régularité du noyau de covariance. De plus, la courbe noire représente le mode du processus gaussien conditionnel qui respecte à la fois la contrainte de monotonie décroissante et les contraintes linéaires de type égalité (8.3). Les courbes en tirets noirs représentent un intervalle de confiance à 95% calculé par simulation.

Sur la Figure 53, les courbes en gris représentent les simulations du processus

8.7. ÉTUDE EMPIRIQUE

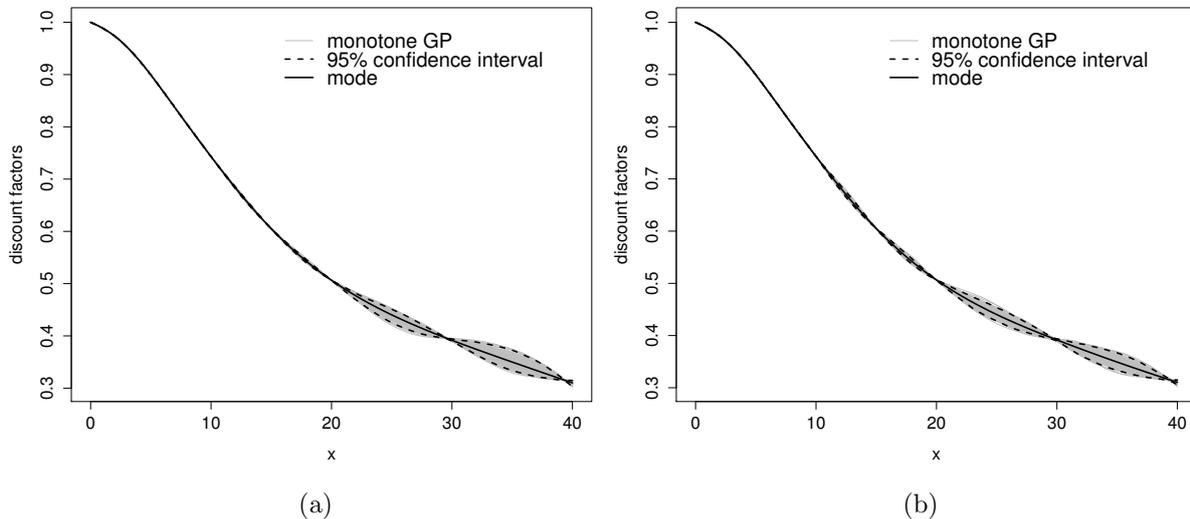


FIGURE 52 – Simulations d’un processus gaussien (trajectoires grises) conditionnellement décroissant en utilisant le noyau Matérn 5/2 comme fonction de covariance avec les paramètres $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.3, 30.8)$ (Figure 52a) et le noyau Matérn 3/2 avec les paramètres $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.2, 47.9)$ (Figure 52b).

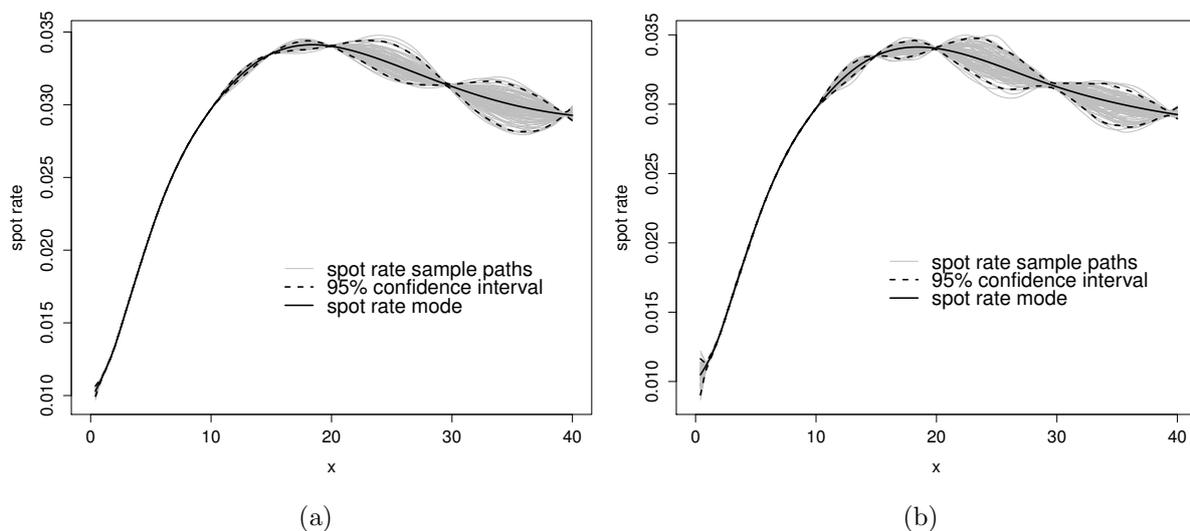


FIGURE 53 – Taux au comptant pour les simulations et le mode du processus gaussien conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 53a (resp. Figure 53b).

$-\frac{1}{x} \log(Y^N(x))$ conditionnellement aux conditions linéaires de type égalité et inégalité. La courbe en noir correspondant à la fonction $-\frac{1}{x} \log(M_K(x | A, \mathbf{b}))$. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 53a (resp. Figure 53b).

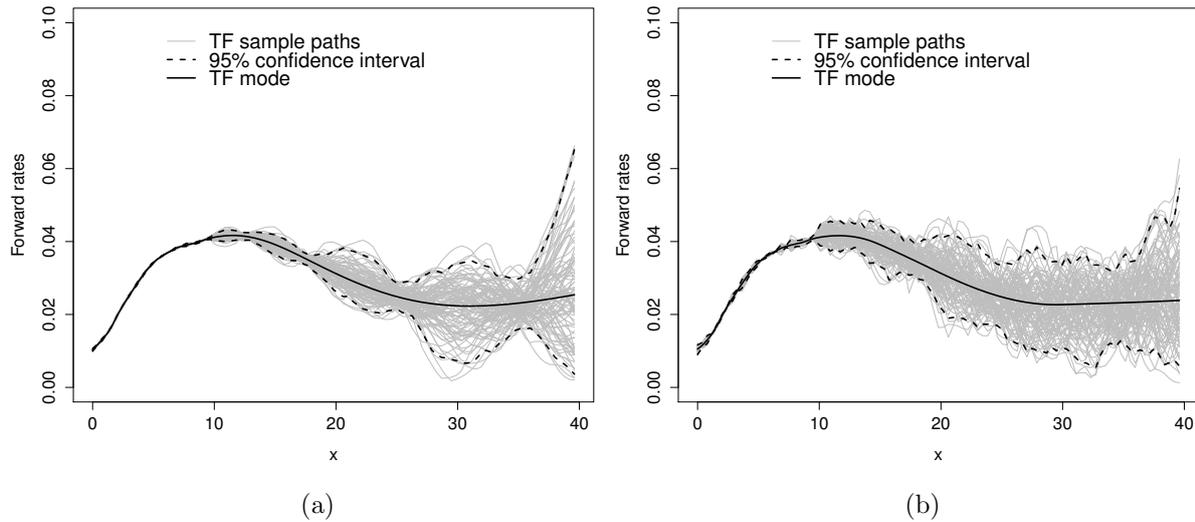


FIGURE 54 – Simulations du taux forward et mode du PG conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 54a (resp. Figure 54b).

Sur la Figure 54, les courbes en gris représentent $-\frac{d}{dx} \log Y^N(x)$. La courbe en noir correspond à $-\frac{d}{dx} \log M_K(x | A, \mathbf{b})$. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 54a (resp. Figure 54b).

Simulations en dimension 2. Dans ce paragraphe, on considère le cas de dimension 2. On étudie ici la variation de facteurs d'actualisation en fonction de la maturité et de la date de cotation. Ces facteurs d'actualisation sont décroissants avec la maturité, c'est-à-dire par rapport à la première variable. Notre but dans ce paragraphe est d'intégrer les données définies par les différentes dates de cotation et de simuler les surfaces correspondantes. Pour cela, on utilise le modèle décrit dans la Section 8.5. Quitte à normaliser, on suppose que la deuxième variable est dans l'intervalle $[0, 1]$.

Sur la Figure 55, on représente le mode du processus gaussien conditionnel sous contraintes de monotonie (décroissante) par rapport à la première variable (maturité). Sur cette figure, on utilise les mêmes dates de cotation définies par la Table 8.1. Si l'on fixe la deuxième variable à n'importe quelle date, la courbe décroissante correspondante représente le facteur d'actualisation à cette date de cotation.

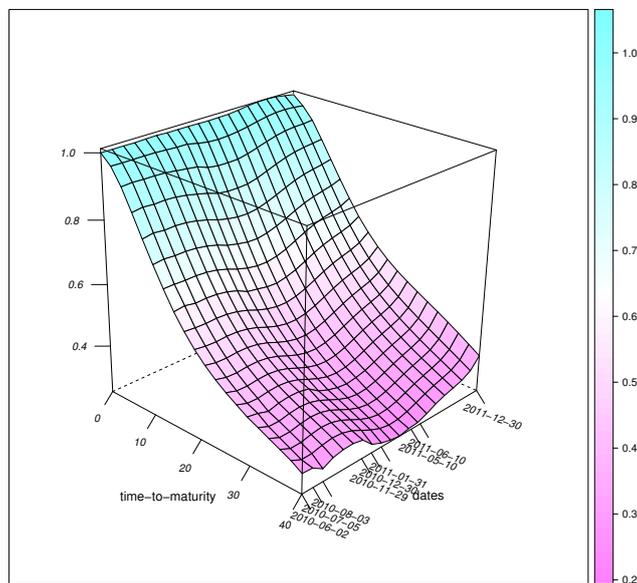


FIGURE 55 – Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable seulement.

8.7.2 Overnight Indexed Swaps (OIS) discount curve

Des données réelles de Overnight Indexed Swaps (OIS) sont utilisées dans cette section.

Estimation des paramètres. On estime les paramètres de portée $\hat{\theta}_{M_5}$ et $\hat{\theta}_{M_3}$ qui correspondent respectivement au noyau Matérn 5/2 et Matérn 3/2. Les valeurs optimales dans les deux dernières colonnes de la Table 8.2 correspondent à la valeur optimale du critère EQM empirique défini par (8.7). Avec ces résultats numériques, nous remarquons que les paramètres estimés ($\hat{\theta}_G$ et $\hat{\theta}_M$) sont stables pour les différentes dates de cotation. De plus, les valeurs optimales du critère EQM empirique sont très proches pour les deux fonction de covariance. Cela étant, les valeurs optimales correspondant au noyau Matérn 5/2 sont légèrement plus faibles que celles du noyau Matérn 3/2.

Sur la Figure 56, on représente la fonction à optimiser en utilisant les données OIS au 15/12/2011.

Sur la Figure 57, on considère les données OIS au 15/12/2011. Les trajectoires simulées (courbes en gris) sont obtenues par le modèle (8.2) avec $N = 50$ sous contraintes de monotonie (décroissante) et sans tenir compte de l'avant-dernière contrainte égalité. Sur la Figure 57a, on fixe le paramètre de variance σ^2 à 1 et on simule le processus gaussien conditionnellement monotone en utilisant le noyau Matérn 5/2 comme fonction de

CHAPITRE 8. ESTIMATION DE LA COURBE D'ACTUALISATION ET DE
PROBABILITÉS DE DÉFAUT PAR KRIGEAGE SOUS CONTRAINTES

TABLE 8.2 – Estimation des paramètres en utilisant la méthode de VC adaptée aux contraintes (OIS data).

Date	$\hat{\theta}_{M_5}$	$\hat{\theta}_{M_3}$	Valeur optimale Matérn 5/2	Valeur optimale Matérn 3/2
03/06/2010	19.2	31.9	9.4e-05	1.6e-04
04/10/2010	20.6	31.8	7.4e-05	1.2e-04
31/12/2010	18.7	33.4	8.4e-05	1.50e-04
04/03/2011	19.1	27.8	4.7e-05	8.0e-05
15/06/2011	18.2	27.3	6.9e-05	1.1e-04
10/10/2011	23.9	53.7	5.3e-05	1.2e-04
14/11/2011	23.9	57.4	7.3e-05	1.5e-04
15/12/2011	24.3	60.7	2.8e-04	1.8e-04

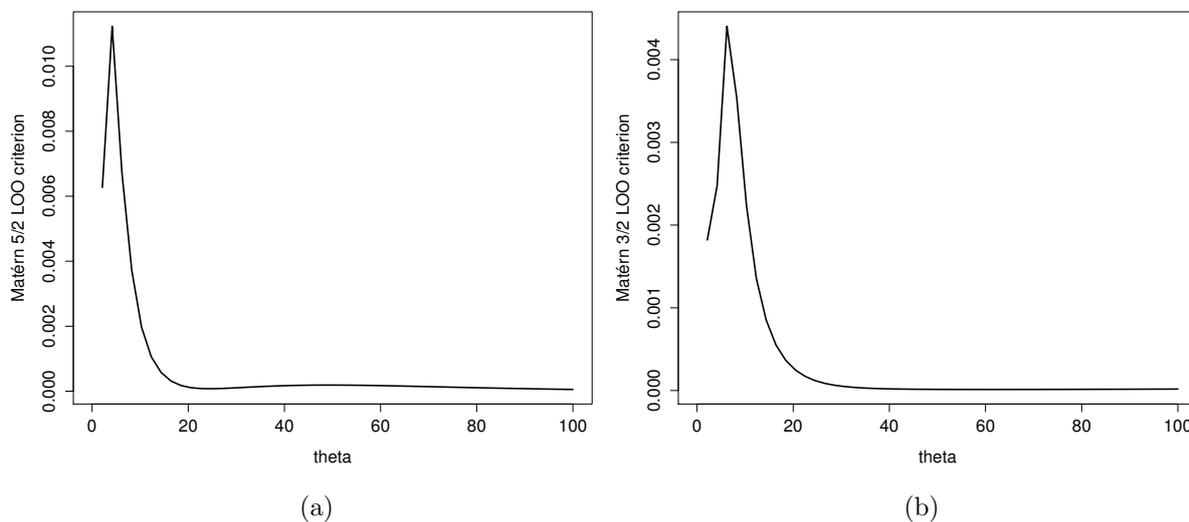


FIGURE 56 – La fonction à optimiser dans le critère LOO (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (Figure 56a) et le noyau Matérn 3/2 (Figure 56b).

8.7. ÉTUDE EMPIRIQUE

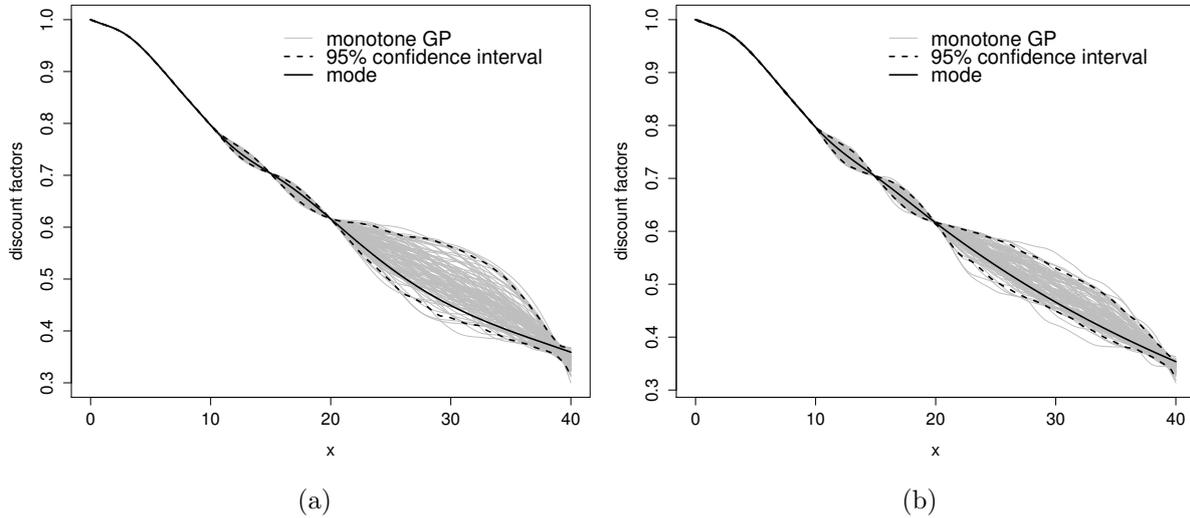


FIGURE 57 – Simulations d’un processus gaussien conditionnellement décroissant et sans tenir compte de l’avant-dernière contrainte égalité. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé Figure 57a (resp. Figure 57b) avec le paramètre de portée $\hat{\theta}$ associé. Le paramètre d’échelle $\hat{\sigma}^2$ est fixé à 1 pour les deux figures.

covariance avec $\hat{\theta}_{M_5} = 24.3$. Par contre, le noyau Matérn 3/2 est utilisé sur la Figure 57b avec $\hat{\theta}_{M_3} = 60.7$. Sur les deux figures, la courbe noire représente le mode du processus gaussien conditionnellement décroissant. Notons que cette courbe est décroissante sur tout le domaine et qu’elle respecte les contraintes linéaires de type égalité (8.3).

Simulations en dimension 1. Sur la Figure 58, on donne deux exemples numériques du processus gaussien conditionnel en utilisant les données OIS au 15/12/2011 avec $N = 50$. La Figure 58a montre les simulations d’un processus gaussien (courbes en gris) conditionnellement monotone en utilisant le noyau Matérn 5/2 avec $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.5, 24.3)$ estimés par la méthode de VC adaptée. Sur la Figure 58b, le noyau Matérn 3/2 est utilisé avec $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.2, 60.7)$. Sur les deux figures, le mode du processus gaussien conditionnel (courbe en noir) respecte les contraintes linéaires (8.3) et est décroissante sur tout le domaine. Notons que les trajectoires de la Figure 58a sont plus régulières que celles de la Figure 58b. Cela est lié à nouveau à la régularité du noyau de covariance.

Sur la Figure 59, les courbes en gris correspondent aux réalisations du processus $-\frac{1}{x} \log(Y^N(x))$ conditionnellement aux contraintes linéaires de type égalité et inégalité.

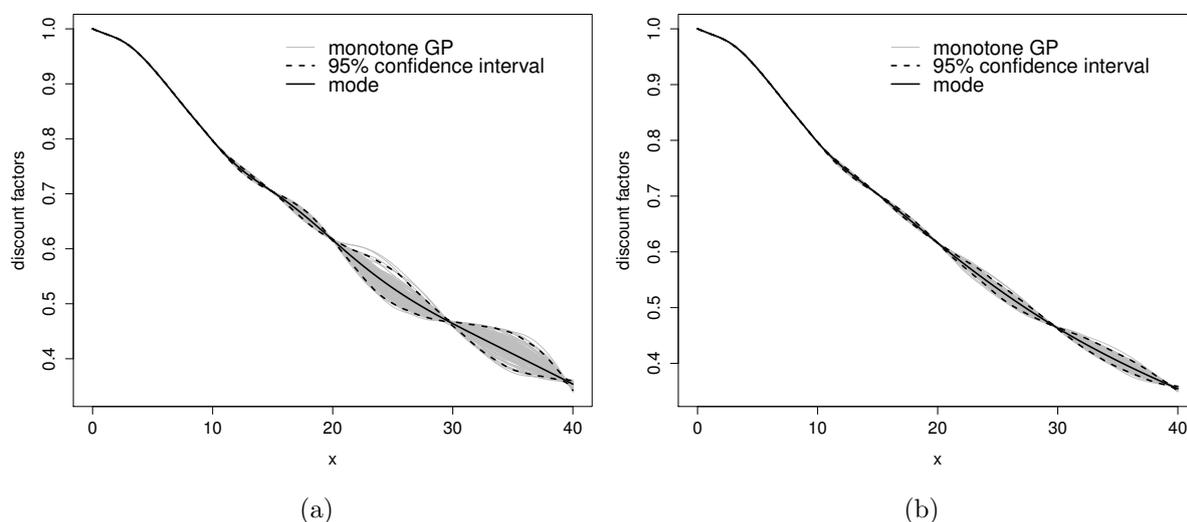


FIGURE 58 – Simulation d'un processus gaussien conditionnellement monotone en utilisant le noyau Matérn 5/2 avec $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.5, 24.3)$ (Figure 58a) et le noyau Matérn 3/2 avec $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.2, 60.7)$ (Figure 58b).

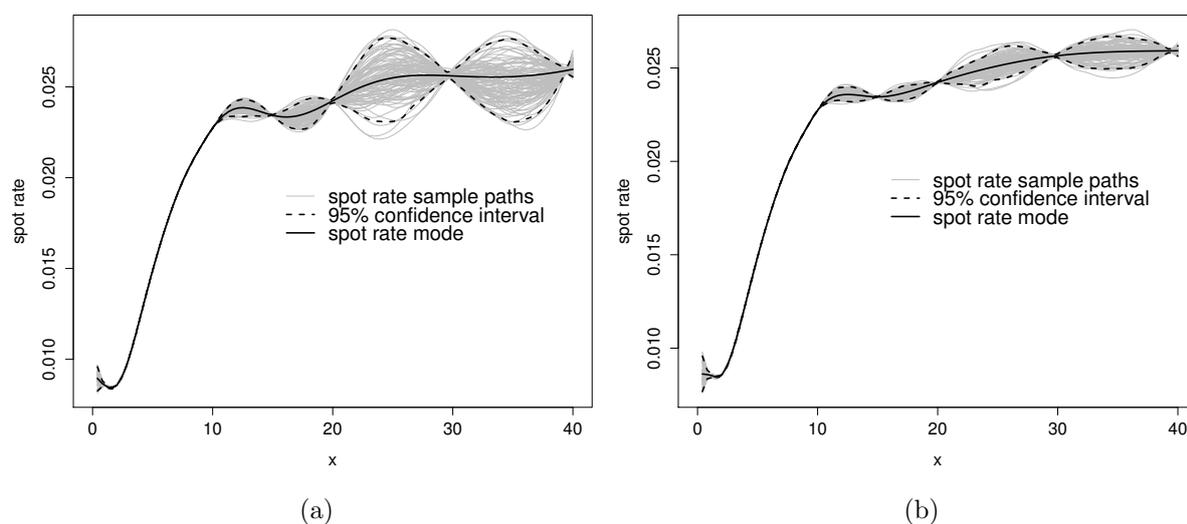


FIGURE 59 – Taux au comptant pour les trajectoires simulées et le mode du processus gaussien conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 59a (resp. Figure 59b).

8.7. ÉTUDE EMPIRIQUE

La courbe en noir représente la fonction $-\frac{1}{x} \log(M_K(x | A, \mathbf{b}))$. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 59a (resp. Figure 59b).

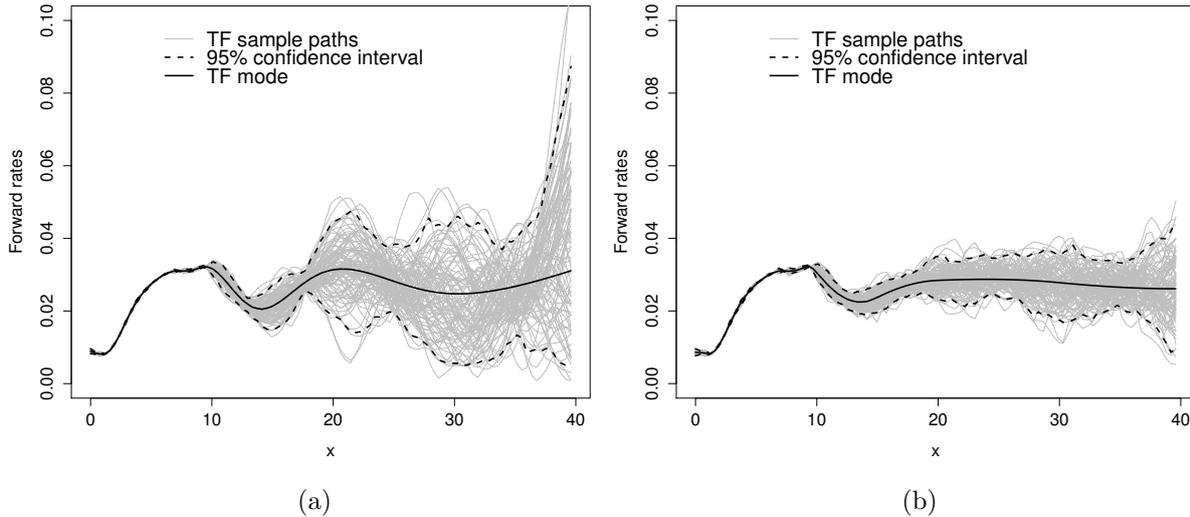


FIGURE 60 – Simulations du taux forward et mode du PG conditionnel. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 60a (resp. Figure 60b).

Sur la Figure 60, les courbes en gris représentent $-\frac{d}{dx} \log Y^N(x)$. La courbe en noir correspond à $-\frac{d}{dx} \log M_K(x | A, \mathbf{b})$. Le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) est utilisé sur la Figure 60a (resp. Figure 60b).

Simulations en 2D. Sur la Figure 61, on représente le mode du processus gaussien conditionnellement monotone (décroissant) par rapport à la première variable seulement. Sur cette figure, le modèle défini dans la Section 8.5 est appliqué en utilisant les différentes dates de cotation définies dans la Table 8.2.

8.7.3 Credit Default Swaps (CDS) data

Des données réelles de Credit Default Swaps (CDS) sont utilisées dans cette section.

Estimation des paramètres. À nouveau on estime le paramètre de portée θ par la méthode de VC adaptée décrite dans la Section 8.6 en utilisant les noyaux Matérn 5/2 et 3/2. Remarquons (voir Table 8.3) que ces paramètres ($\hat{\theta}_{M_5}$ et $\hat{\theta}_{M_3}$) sont stables pour les différentes dates. De plus, les valeurs optimales sont presque les mêmes pour les deux noyaux de covariance. Cela étant, les valeurs optimales correspondant au noyau Matérn

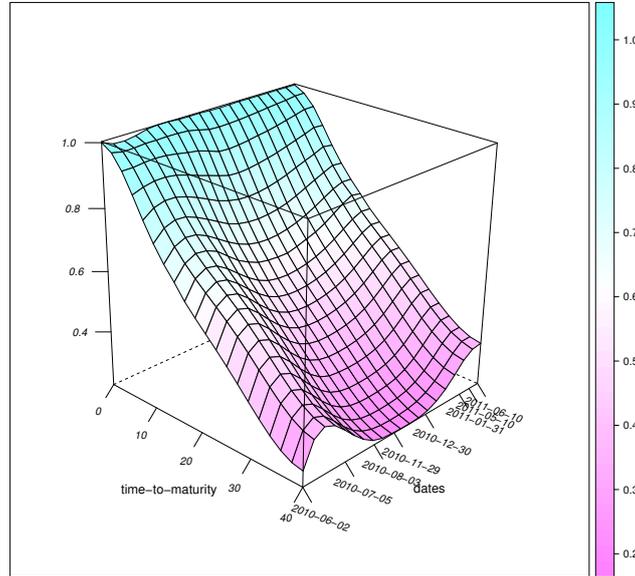


FIGURE 61 – Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable en utilisant les données OIS définies dans la Table 8.2.

5/2 sont légèrement plus faibles que celles du noyau Matérn 3/2.

Sur la Figure 62, on considère les données CDS au 06/01/2005. La Figure 62a montre la fonction à optimiser (8.8) en utilisant le noyau Matérn 5/2. Sur la Figure 62b, on montre la même fonction à optimiser en utilisant le noyau Matérn 3/2. Sur la Figure 62a, la valeur optimale du critère EQM empirique est égale à 4.9×10^{-7} pour $\hat{\theta}_{M_5} = 10.5$. Par contre, elle est égale à 5.2×10^{-5} pour $\hat{\theta}_{M_3} = 12.9$ sur la Figure 62b.

Simulations en 1D. Sur la Figure 63, on donne deux exemples numériques en utilisant les données CDS au 06/01/2005 avec $N = 50$. Remarquons que ces trajectoires sont décroissantes sur tout le domaine. Sur la Figure 63a, le noyau Matérn 5/2 est utilisé avec $(\hat{\sigma}_{M_5}, \hat{\theta}_{M_5}) = (0.2, 10.5)$ estimés par la méthode de VC adaptée décrite dans la Section 8.6. Sur la Figure 63b, le noyau Matérn 3/2 est utilisé avec $(\hat{\sigma}_{M_3}, \hat{\theta}_{M_3}) = (0.06, 12.9)$. Remarquons encore que les réalisations (courbes en gris) sont plus régulières sur la Figure 63a que celles de la Figure 63b. Sur les deux figures, le mode du processus gaussien conditionnel (courbe en noir) défini dans (8.4) respecte les contraintes linéaires (8.3) et est monotone (décroissant) sur tout le domaine. Les courbes en tirets noirs représentent l'intervalle de confiance à 95% obtenu par simulation.

8.7. ÉTUDE EMPIRIQUE

TABLE 8.3 – Estimation des paramètres en utilisant la méthode de VC adaptée (CDS data).

Date	$\hat{\theta}_{M_5}$	$\hat{\theta}_{M_3}$	Optimal value Matérn 5/2	Optimal value Matérn 3/2
06/01/2005	10.5	12.9	4.9e-07	5.2e-05
02/02/2006	15.5	24.8	1.8e-07	6.3e-06
20/03/2007	20.8	31.7	6.5e-07	3.7e-06
04/04/2008	11.4	21.6	2.6e-06	5.5e-06
11/05/2009	10.1	17.7	4.2e-5	2.7e-05
21/06/2010	10.1	16.4	3.4e-06	1.2e-05
14/07/2011	17.0	23.7	1.2e-06	2.3e-05
23/08/2012	10.8	15.8	1.5e-06	4.3e-06

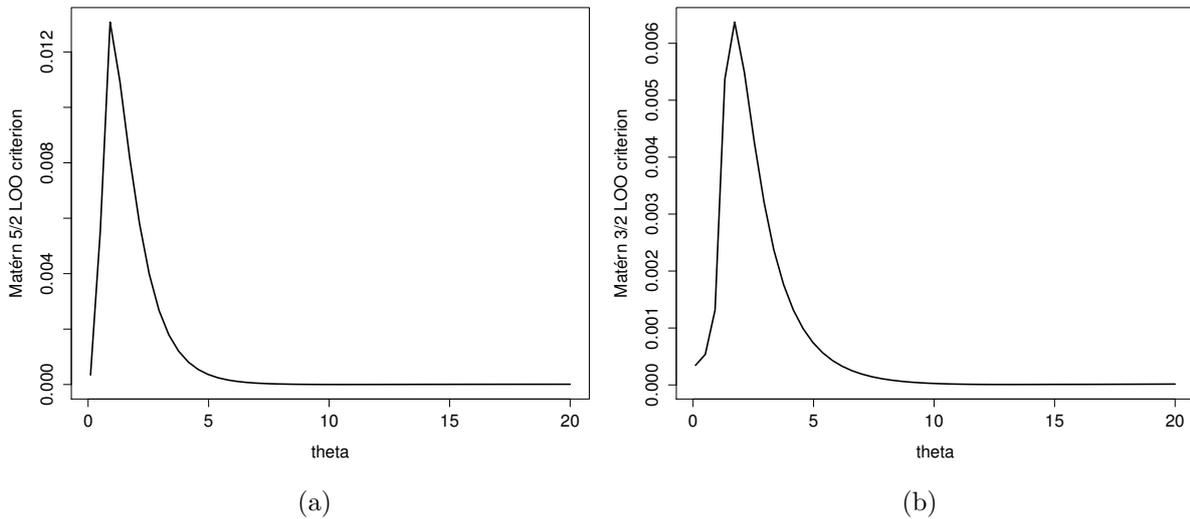


FIGURE 62 – La fonction à optimiser (8.7) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) Figure 62a (resp. Figure 62b).

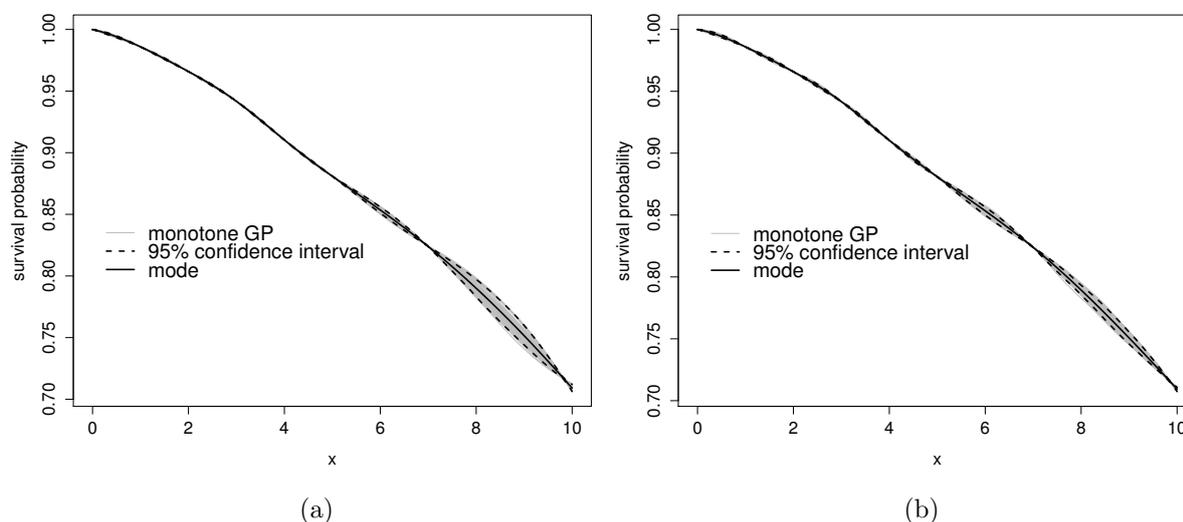


FIGURE 63 – Simulations d'un processus gaussien (courbes en gris) conditionnellement monotone (décroissant) en utilisant le noyau Matérn 5/2 (resp. Matérn 3/2) Figure 63a (resp. Figure 63b).

Simulations en 2D. Sur la Figure 64, on représente le mode du processus gaussien conditionnellement monotone (décroissant) par rapport à la première variable seulement. Sur cette figure, le modèle défini dans la Section 8.5 est appliqué en utilisant les différentes dates de cotation définies dans la Table 8.3.

8.8 Conclusion

Dans ce chapitre, une courbe d'actualisation ainsi que des probabilités de défaut sont estimés en utilisant la Régression par Processus Gaussien sous contraintes développée dans cette thèse. Comme nous avons pu le voir, l'adaptation de la méthode au cas de contraintes linéaires de type égalité quelconque ne pose pas de difficulté. L'estimation des paramètres de la fonction de covariance du processus gaussien initial a été possible en adaptant également la méthode de validation croisée. Pour étudier le modèle proposé, quelques exemples numériques en dimension 1 et 2 sont inclus. Les résultats numériques montrent que les simulations du processus gaussien conditionnel respectent à la fois les contraintes linéaires de type égalité et la monotonie décroissante par rapport à la maturité.

8.8. CONCLUSION

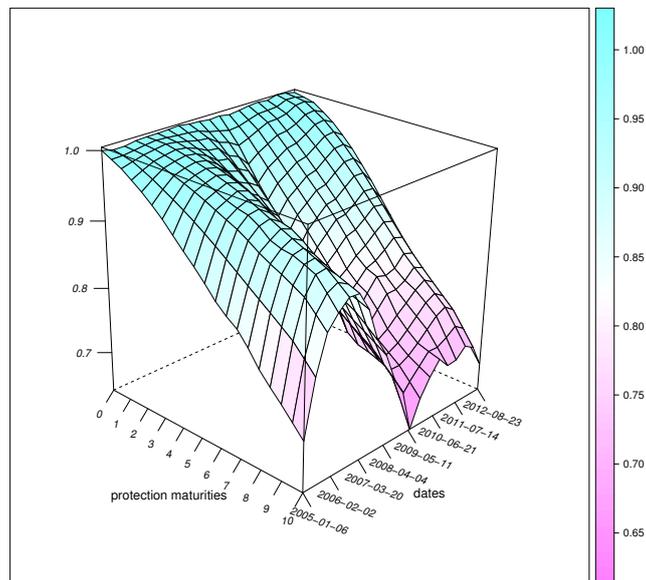


FIGURE 64 – Le mode du processus gaussien conditionnellement monotone par rapport à la première variable en utilisant les différentes dates de cotation définies dans la Table 8.3.

Chapitre 9

Conclusion et perspectives

9.1 Conclusion

Dans ce travail, est considéré le problème de l'interpolation d'une fonction connue pour avoir certaines propriétés comme la positivité, la monotonie ou encore la convexité. Deux approches sont envisagées. La première conduit à un problème d'interpolation optimale sous contraintes linéaires de type inégalité dans un RKHS. La seconde de nature probabiliste considère le même problème comme un problème de régression par processus gaussien sous les mêmes contraintes inégalité.

Une méthode d'approximation est proposée pour résoudre le problème de régression par processus gaussien sous contraintes (cf. Chapitre 3). Les simulations du processus gaussien conditionnel respectent à la fois les conditions d'interpolation et l'ensemble des contraintes inégalité. Par exemple, ces simulations sont monotones sur tout le domaine dans le cas d'une contrainte de monotonie. La méthodologie repose sur une approximation du processus gaussien initial par une combinaison linéaire finie de fonctions de base déterministes avec un jeu de coefficients aléatoires qui forment un vecteur gaussien. Ces fonctions de base peuvent être choisies de sorte que les contraintes inégalité sur le processus gaussien de dimension finie associé soient *équivalentes* à un nombre fini de contraintes inégalité sur les coefficients. Par suite, le problème de simulation du processus gaussien conditionnel est réduit à la simulation d'un vecteur gaussien tronqué à un sous-ensemble convexe de \mathbb{R}^d .

De ce fait, une méthode de rejet pour simuler un vecteur gaussien tronqué sur n'importe quel sous-espace convexe a été développée dans le Chapitre 4. Une comparaison avec les algorithmes de rejet existants est faite.

Dans le Chapitre 3, un estimateur bayésien appelé *mode* est défini et vérifie à la

fois les conditions d'interpolation et les contraintes inégalité. C'est le Maximum *A Posteriori* (MAP) associé à la loi conditionnelle du processus approché. Par une analyse asymptotique, la convergence d'un tel estimateur est établie et permet de généraliser l'équivalence ou la correspondance entre les deux approches krigeage et splines. C'est le résultat théorique principal de la thèse (cf. Chapitres 6 et 7).

Les hyper-paramètres de la fonction de covariance ont été estimés et la méthode de validation croisée a été adaptée (cf. Chapitre 5). Deux exemples numériques en dimension 1 et 2 sont proposés.

Finalement, une application réelle dans le domaine de l'assurance (actuariat) pour estimer une courbe d'actualisation a été développée dans le Chapitre 8.

9.2 Perspectives

Une méthode d'approximation a été développée pour résoudre un problème d'interpolation optimale sous contraintes inégalité dans un RKHS ou le problème (équivalent) d'estimation d'une fonction dans le cadre bayésien de la Régression par Processus Gaussien.

La mise en œuvre de cette méthode exige la considération d'espaces d'approximation uniforme de dimension finie dans un espace de fonctions continues, voire de classe \mathcal{C}^1 ou \mathcal{C}^2 (cas de la monotonie ou convexité, cf. Chapitre 3). Dans cette thèse, les espaces d'approximation considérés sont essentiellement des espaces de fonctions continues affines par morceaux ou des éléments P1 par analogie avec la méthode des Éléments Finis utilisée pour résoudre une EDP. En particulier, les résultats théoriques des Chapitres 6 et 7 ont été établis uniquement dans le cadre de tels espaces. L'utilisation d'autres espaces d'approximation est posée en relation avec la régularité des fonctions du RKHS H associé ou de la régularité des trajectoires du processus gaussien correspondant (qui ne sont pas dans le RKHS sauf en dimension finie). Dans le même sens, la vitesse de convergence de la méthode reste à analyser en relation avec la discrétisation (choix des nœuds et des fonctions de base). Ces aspects semblent incontournables pour aborder le cas multi-dimensionnel dès la dimension $d = 3$.

Un autre aspect de la mise en œuvre de cette méthode concerne la simulation d'un vecteur gaussien tronqué à un ensemble convexe dans un espace de dimension plus au moins grande, laquelle dépend justement de la vitesse de convergence qui vient d'être évoquée. À nouveau, pour traiter en pratique le cas multi-dimensionnel, il est indispensable d'envisager une technique de simulation adaptée. Une idée naturelle est de combiner une technique de rejet (par exemple, l'algorithme RSM proposé au Chapitre 4)

avec une technique de simulation par chaîne de Markov (McMC).

Un dernier aspect de la mise en œuvre concerne l'estimation des paramètres du noyau de covariance ou du noyau reproduisant. D'autres méthodes peuvent être envisagées, en particulier la méthode d'Estimation par Maximum de Vraisemblance (EMV). La méthode envisagée dans ce travail basée sur une technique de Validation Croisée (VC) peut également faire l'objet de développements (autre critère que l'EQM qui soit mieux adapté).

Terminons en disant que d'autres aspects de ce travail n'ont pas été abordés. Signalons en particulier le cas des observations bruitées ou de l'approximation optimale dans un RKHS du point de vue déterministe (splines d'approximation).

9.2. PERSPECTIVES

Annexe A

Dérivées partielles du noyau de covariance

Le noyau gaussien ainsi que ses dérivées partielles sont de la forme :

$$K(x - x', \theta) = \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\theta^2}\right),$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x} = -\frac{1}{\theta^2} (x - x') \times K(x - x', \theta)$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x'} = -\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial x'} = \frac{1}{\theta^2} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\theta^2}\right) \times \left(1 - \frac{(x-x')^2}{\theta^2}\right)$$

$$\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial^2 x} = -\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial x'}$$

$$\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial^2 x'} = -\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial x'}$$

$$\frac{\partial^3 K(x-x', \theta)}{\partial x^2 \partial x'} = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\theta^2}\right) \times \frac{(x-x')}{\theta^4} \times \left(-3 + \frac{(x-x')^2}{\theta^2}\right)$$

$$\frac{\partial^3 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial (x^2)'} = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\theta^2}\right) \times \frac{(x-x')}{\theta^4} \times \left(3 - \frac{(x-x')^2}{\theta^2}\right)$$

$$\frac{\partial^4 K(x-x', \theta)}{\partial x^2 \partial^2 (x^2)'} = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\theta^2}\right) \times \left(\frac{(x-x')^4}{\theta^8} - \frac{6(x-x')^2}{\theta^6} + \frac{3}{\theta^4}\right)$$

Le noyau Matérn 3/2 ainsi que ses dérivées partielles sont donnés par les équations

suivantes :

$$K(x - x', \theta) = \left(1 + \frac{\sqrt{3} \times |x - x'|}{\theta} \right) \times \exp \left(-\frac{\sqrt{3} \times |x - x'|}{\theta} \right)$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x} = \frac{\sqrt{3}}{\theta} \times \text{sign}(x - x') \times \exp \left(-\frac{\sqrt{3} \times |x-x'|}{\theta} \right) \times \left(-\frac{\sqrt{3} \times |x-x'|}{\theta} \right)$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x'} = -\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial x'} = \frac{3}{\theta^2} \times \exp \left(-\frac{\sqrt{3} \times |x-x'|}{\theta} \right) \times \left(1 - \frac{\sqrt{3} \times |x-x'|}{\theta} \right)$$

Le noyau Matérn 5/2 ainsi que ses dérivées partielles sont donnés par les équations suivantes :

$$K(x - x', \theta) = \left(1 + \frac{\sqrt{5} \times |x - x'|}{\theta} + \frac{5 \times (x - x')^2}{3\theta^2} \right) \times \exp \left(-\frac{\sqrt{5} \times |x - x'|}{\theta} \right)$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x} = \left(\frac{\sqrt{5} \text{sign}(x-x')}{\theta} + \frac{10 \times (x-x')}{3\theta^2} \right) \times \exp \left(-\frac{\sqrt{5} \times |x-x'|}{\theta} \right) - \frac{\sqrt{5} \text{sign}(x-x')}{\theta} \times K(x - x', \theta)$$

$$\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x'} = -\frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 K(x-x', \theta)}{\partial x \partial x'} &= \left(\frac{-10}{3\theta^2} \exp \left(-\frac{\sqrt{5} \times |x-x'|}{\theta} \right) + \frac{\sqrt{5} \text{sign}(x-x')}{\theta} \exp \left(-\frac{\sqrt{5} \times |x-x'|}{\theta} \right) \times \frac{\sqrt{5} \text{sign}(x-x')}{\theta} + \frac{10 \times (x-x')}{3 \times \theta^2} \right) \\ &- \frac{\sqrt{5}}{\theta} \times \text{sign}(x - x') \times \frac{\partial K(x-x', \theta)}{\partial x'} \end{aligned}$$

Annexe B

Liste des articles scientifiques

B.1 Articles de journal

- H. MAATOUK and X. BAY (2014). Gaussian Process Emulators for Computer Experiments with Inequality Constraints. In revision, preprint <https://tel.archives-ouvertes.fr/hal-01096751/document>
- X. BAY, L. GRAMMONT and H. MAATOUK (2015). A New Method for Smoothing and Interpolating with Inequality Constraints. Submitted, preprint <http://hal.ird.fr/ICJ/hal-01136466v1>
- X. BAY, L. GRAMMONT and H. MAATOUK (2015). Generalization of the Kimeldorf-Wahba Correspondence in the Case of Constrained Interpolation. Submitted
- A. COUSIN, H. MAATOUK and D. RULLIÈRE (2015). Kriging of Financial Term-Structures. Submitted, preprint https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01206388/file/Article%20Yeild%20Curve_modif_Hassan_25_Sep.pdf

B.2 Chapitre proceeding dans une conférence sélective

- H. MAATOUK and X. BAY (2014). A New Rejection Sampling Method for Truncated Multivariate Gaussian Random Variables Restricted to Convex Sets. To appear in Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2014. Springer-Verlag, Berlin, 2016 Preprint <http://hal-emse.ccsd.cnrs.fr/FAYOL-ENSMSE/hal-01063978v1>

B.3 Proceeding

- H. MAATOUK, O. ROUSTANT and Y. RICHEL (2015). Cross-Validation Estimation of Covariance Hyper-Parameters of Gaussian Processes with Inequality Constraints. *Procedia Environmental Sciences*, 27 (2015), pp. 38 – 44. Spatial Statistics conference 2015.

B.4 Package

- H. MAATOUK and Y. RICHEL (2015). R package ‘constrKriging’ available online at <https://github.com/maatouk/constrKriging>.

Annexe C

Liste des conférences internationales

- Spatial Statistics Emerging Patterns, June 9 - 12, 2015, Avignon, France
- Mascot-Num annual conference 2015, April 8 - 10, 2015, St-Étienne, France
- Uncertainty Computer Model UCM2014, July 28 - 30, 2015, Sheffield, United Kingdom
- Mascot-Num annual conference 2014, April 23 - 25, 2014, Zürich, Switzerland
- Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, April 6 - 11, 2015, KU Leuven, Belgium

C.1 Invitations

- Séminaire à ISFA (Institut de Science Financière et d'Assurances), June 26 2015, Lyon, France http://isfa.univ-lyon1.fr/le_seminaire_du_laboratoire_saf.html
- Gaussian Random Field Simulation GRF-Sim2014 Workshop, November 24 to 27 2014, Berne, Suisse <http://www.clementchevalier.com/index.php/grfsimu>
- Journée des thèses avec l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire), October 14 to 17 2013, presqu'île de Giens, France http://www.irsn.fr/FR/Larecherche/Actualites_Agenda/Actualites/Pages/2013-08-08-journee-theses-2013.aspx#.VEEWd20mVSA

C.1. INVITATIONS

Bibliographie

- [Abrahamsen and Benth, 2001] Abrahamsen, P. and Benth, F. E. (2001). Kriging with inequality constraints. *Mathematical Geology*, 33(6) :719–744.
- [Akima, 1970] Akima, H. (1970). A new method of interpolation and smooth curve fitting based on local procedures. *J. ACM*, 17(4) :589–602.
- [Ametrano and Bianchetti, 2009] Ametrano, F. and Bianchetti, M. (2009). *Bootstrapping the illiquidity : Multiple yield curves construction for market coherent forward rates estimation*. Risk Books.
- [Andersen, 2007] Andersen, L. (2007). Discount curve construction with tension splines. *Review of Derivatives Research*, 10(3) :227–267.
- [Andersson and Elfving, 1991] Andersson, L.-E. and Elfving, T. (1991). Interpolation and approximation by monotone cubic splines. *Journal of Approximation Theory*, 66(3) :302 – 333.
- [Anger and Portenier, 1992] Anger, B. and Portenier, C. (1992). *Radon Integrals : An Abstract Approach to Integration and Riesz Representation Through Function Cones*. Progress in Mathematics. Birkhäuser Boston.
- [Aronszajn, 1950] Aronszajn, N. (1950). Theory of reproducing kernels. *Transactions of the American Mathematical Society*, 68.
- [Bachoc, 2013] Bachoc, F. (2013). Cross validation and maximum likelihood estimations of hyper-parameters of gaussian processes with model misspecification. *Computational Statistics & Data Analysis*, 66(0) :55 – 69.
- [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004] Berlinet, A. and Thomas-Agnan, C. (2004). *Reproducing Kernel Hilbert Spaces in Probability and Statistics*. Kluwer Academic Publishers.
- [Botts, 2013] Botts, C. (2013). An Accept-Reject Algorithm For the Positive Multivariate Normal Distribution. *Computational Statistics*, 28(4) :1749–1773.
- [Boyd and Vandenberghe, 2004] Boyd, S. and Vandenberghe, L. (2004). *Convex Optimization*. Cambridge University Press, New York, NY, USA.
- [Breslaw, 1994] Breslaw, J. (1994). Random sampling from a truncated multivariate normal distribution. *Applied Mathematics Letters*, 7(1) :1 – 6.

- [Casella and George, 1992] Casella, G. and George, E. I. (1992). Explaining the Gibbs sampler. *The American Statistician*, 46(3) :167–174.
- [Cherruault, 1968] Cherruault, Y. (1968). Une méthode de minimisation et applications. *Revue Française d'informatique et de recherche opérationnelle, série rouge tome 2*, 2(2) :31–52.
- [Chibane et al., 2009] Chibane, M., Selvaraj, J., and Sheldon, G. (2009). Building curves on a good basis. working paper.
- [Chopin, 2011] Chopin, N. (2011). Fast Simulation of Truncated Gaussian Distributions . *Statistics and Computing*, 21(2) :275–288.
- [Cramér and Leadbetter, 1967] Cramér, H. and Leadbetter, R. (1967). *Stationary and related stochastic processes : sample function properties and their applications*. Wiley series in probability and mathematical statistics. Tracts on probability and statistics. Wiley.
- [Cressie, 1993] Cressie, N. A. C. (1993). *Statistics for Spatial Data, revised edition*. John Wiley & Sons, New York.
- [Csiszar et al., 1999] Csiszar, I., Gamgoa, F., and Gassiat, E. (1999). Mem pixel correlated solutions for generalized moment and interpolation problems. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 45(7) :2253–2270.
- [Da Veiga and Marrel, 2012] Da Veiga, S. and Marrel, A. (2012). Gaussian process modeling with inequality constraints. *Annales de la faculté des sciences de Toulouse*, 21(3) :529–555.
- [Delecroix et al., 1996] Delecroix, M., Simioni, M., and Thomas-agnan, C. (1996). Functional estimation under shape constraints. *Journal of Nonparametric Statistics*, 6(1) :69–89.
- [Delecroix and Thomas-Agnan, 1995] Delecroix, M. and Thomas-Agnan, C. (1995). A shape constrained smoother : simulation study. *Computational Statistics*, 10 :155–175.
- [Delecroix and Thomas-Agnan, 2000] Delecroix, M. and Thomas-Agnan, C. (2000). *Spline and Kernel Regression under Shape Restrictions*, pages 109–133. John Wiley & Sons, Inc.
- [Devroye, 1986] Devroye, L. (1986). *Non-Uniform Random Variate Generation*. Springer-Verlag.
- [Dole, 1999] Dole, D. (1999). Cosmo : A constrained scatterplot smoother for estimating convex, monotonic transformations. *Journal of Business & Economic Statistics*, 17(4) :444–455.
- [Dontchev, 1993] Dontchev, A. (1993). Best interpolation in a strip. *Journal of Approximation Theory*, 73(3) :334 – 342.
- [Doob, 1975] Doob, J. L. (1975). Stochastic process measurability conditions. *Annales de l'institut Fourier*, 25(3-4) :163–176.

- [Dougherty et al., 1989] Dougherty, R. L., Edelman, A., and Hyman, J. M. (1989). Nonnegativity-, monotonicity-, or convexity-preserving cubic and quintic Hermite interpolation. *Mathematics of Computation*, 52(186) :471–494.
- [Dubrule and Kostov, 1986] Dubrule, O. and Kostov, C. (1986). An interpolation method taking into account inequality constraints : I. methodology. *Mathematical Geology*, 18(1) :33–51.
- [Duchon, 1976] Duchon, J. (1976). Interpolation des fonctions de deux variables suivant le principe de la flexion des plaques minces. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 10(3) :5–12.
- [Ellis and Maitra, 2007] Ellis, N. and Maitra, R. (2007). Multivariate Gaussian Simulation Outside Arbitrary Ellipsoids. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 16(3) :692–708.
- [Emery et al., 2013] Emery, X., Arroyo, D., and Peláez, M. (2013). Simulating Large Gaussian Random Vectors Subject to Inequality Constraints by Gibbs Sampling. *Mathematical Geosciences*, pages 1–19.
- [Freulon and Fouquet, 1993] Freulon, X. and Fouquet, C. (1993). Conditioning a Gaussian model with inequalities. In Soares, A., editor, *Geostatistics Tróia '92*, volume 5 of *Quantitative Geology and Geostatistics*, pages 201–212. Springer Netherlands.
- [Fries, 2013] Fries, C. P. (2013). Curves and term structure models : Definition, calibration and application of rate curves and term structure models. DZ Bank AG ; LMU Munich, Department of Mathematics.
- [Fritsch and Carlson, 1980] Fritsch, F. and Carlson, R. (1980). Monotone piecewise cubic interpolation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 17(2) :238–246.
- [Gamboa and Gassiat, 1997] Gamboa, F. and Gassiat, E. (1997). Bayesian methods and maximum entropy for ill-posed inverse problems. *The Annals of Statistics*, 25(1) :328–350.
- [Gander and Wanner, 2012] Gander, M. J. and Wanner, G. (2012). From Euler, Ritz, and Galerkin to Modern Computing. *SIAM Review*, 54(4) :627–666.
- [Gelfand et al., 1992] Gelfand, A. E., Smith, A. F. M., and Lee, T.-M. (1992). Bayesian Analysis of Constrained Parameter and Truncated Data Problems Using Gibbs Sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 87(418) :523–532.
- [Geweke, 1986] Geweke, J. (1986). Exact Inference in the Inequality Constrained Normal Linear Regression Model. *Journal of Applied Econometrics*, 1(2) :127–141.
- [Geweke, 1991] Geweke, J. (1991). Efficient Simulation from the Multivariate Normal and Student-t Distributions Subject to Linear Constraints and the Evaluation of Constraint Probabilities. In *Computing Science and Statistics : Proceedings of the 23rd Symposium on the Interface*, pages 571–578.

- [Gilks and Wild, 1992] Gilks, W. R. and Wild, P. (1992). Adaptive Rejection Sampling for Gibbs Sampling. *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)*, 41(2) :337–348.
- [Golchi et al., 2015] Golchi, S., Bingham, D. R., Chipman, H., and Campbell, D. A. (2015). Monotone emulation of computer experiments. *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*, 3(1) :370–392.
- [Goldfarb and Idnani, 1983] Goldfarb, D. and Idnani, A. (1983). A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. *Mathematical Programming*, 27(1) :1–33.
- [Griffiths, 2002] Griffiths, W. E. (2002). A Gibbs sampler for the parameters of a truncated multivariate normal distribution. Department of Economics - Working Papers Series 856, The University of Melbourne.
- [Gupta et al., 2004] Gupta, A. K., González-Farías, G., and Domínguez-Molina, J. (2004). A multivariate skew normal distribution. *Journal of Multivariate Analysis*, 89(1) :181 – 190.
- [Hagan and West, 2006] Hagan, P. S. and West, G. (2006). Interpolation methods for curve construction. *Applied Mathematical Finance*, 13(2) :89–129.
- [Hörmann et al., 2004] Hörmann, W., Leydold, J., and Derflinger, G. (2004). *Automatic Nonuniform Random Variate Generation*. Statistics and Computing. Springer.
- [Hyman, 1983] Hyman, J. M. (1983). Accurate Monotonicity Preserving Cubic Interpolation. *SIAM J. Sci Comput*, 4(4) :645–654.
- [Iwashita, 2013] Iwashita, Y. (2013). Piecewise polynomial interpolations. Open Gamma Technical Report.
- [Janson, 1997] Janson, S. (1997). *Gaussian Hilbert Spaces*, volume 129 of *Cambridge Tracts in Mathematics*. Cambridge University Press.
- [Jun-wu YU, 2011] Jun-wu YU, G.-l. T. (2011). Efficient Algorithms for Generating Truncated Multivariate Normal Distributions. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, 27(4) :601.
- [Kenyon and Stamm, 2012] Kenyon, C. and Stamm, R. (2012). *Discounting, Libor, CVA and Funding : Interest Rate and Credit Pricing*. Palgrave Macmillan.
- [Kimeldorf and Wahba, 1971] Kimeldorf, G. S. and Wahba, G. (1971). A correspondence between Bayesian estimation on stochastic processes and smoothing by splines. *Ann. Math. Statist.*, 2 :495–502.
- [Kostov and Dubrule, 1986] Kostov, C. and Dubrule, O. (1986). An interpolation method taking into account inequality constraints : Ii. practical approach. *Mathematical Geology*, 18(1) :53–73.

- [Kotecha and Djuric, 1999] Kotecha, J. H. and Djuric, P. (1999). Gibbs sampling approach for generation of truncated multivariate Gaussian random variables. In *IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, volume 3, pages 1757–1760.
- [Laud et al., 2010] Laud, P. W., Damien, P., and Shively, T. S. (2010). Sampling Some Truncated Distributions Via Rejection Algorithms. *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 39(6) :1111–1121.
- [Laurent, 1972] Laurent, P. J. (1972). *Approximation et optimisation*. Enseignement des sciences. Hermann, Paris.
- [Laurent, 1980] Laurent, P. J. (1980). An algorithm for the computation of spline functions with inequality constraints. *Séminaire d'analyse numérique de Grenoble, No. 335. Grenoble*.
- [Le Floc'h, 2013] Le Floc'h, F. (2013). Stable interpolation for the yield curve. Calypso Technology.
- [Li and Ghosh,] Li, Y. and Ghosh, S. K. Efficient sampling method for truncated multivariate normal and Student t-distribution subject to linear inequality constraints. http://www.stat.ncsu.edu/information/library/papers/mimeo2649_Li.pdf.
- [Loridan, 1971] Loridan, P. (1971). Sur la minimisation de fonctionnelles convexes par pénalisation. *Revue Française d'informatique et de recherche opérationnelle, série rouge tome 5*, 5(1) :117–133.
- [Maatouk and Bay,] Maatouk, H. and Bay, X. Gaussian Process Emulators for Computer Experiments with Inequality Constraints. in revision, hal-01096751.
- [Maatouk and Bay, 2014] Maatouk, H. and Bay, X. (2014). *A New Rejection Sampling Method for Truncated Multivariate Gaussian Random Variables Restricted to Convex Sets*. To appear in Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2014. Springer-Verlag, Berlin, 2016.
- [Marcotte and David, 1988] Marcotte, D. and David, M. (1988). Trend surface analysis as a special case of irf-k kriging. *Mathematical Geology*, 20(7) :821–824.
- [Martino and Miguez, 2009a] Martino, L. and Miguez, J. (2009a). An adaptive accept/reject sampling algorithm for posterior probability distributions. In *Statistical Signal Processing, 2009. SSP '09. IEEE/SP 15th Workshop on*, pages 45–48.
- [Martino and Miguez, 2009b] Martino, L. and Miguez, J. (2009b). A novel rejection sampling scheme for posterior probability distributions. In *ICASSP 2009. IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing.*, pages 2921–2924.
- [Matheron, 1981] Matheron, G. (1981). Down-to-earth statistics : Solutions looking for geological problems, chapter splines and kriging : their formal equivalence.
- [Micchelli and Utreras, 1988] Micchelli, C. and Utreras, F. (1988). Smoothing and Interpolation in a Convex Subset of a Hilbert Space. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(4) :728–746.

- [Nair, 2009] Nair, M. (2009). *Linear Operator Equations : Approximation and Regularization*. World Scientific.
- [Nelson and Siegel, 1987] Nelson, C. R. and Siegel, A. F. (1987). Parsimonious modeling of yield curves. *Journal of business*, pages 473–489.
- [Philippe and Robert, 2003] Philippe, A. and Robert, C. P. (2003). Perfect simulation of positive Gaussian distributions. *Statistics and Computing*, 13(2) :179–186.
- [Ramsay, 1988] Ramsay, J. O. (1988). Monotone regression splines in action. *Statistical Science*, 3(4) :425–441.
- [Ramsay, 1998] Ramsay, J. O. (1998). Estimating smooth monotone functions. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, 60(2) :365–375.
- [Rasmussen and Williams, 2005] Rasmussen, C. E. and Williams, C. K. I. (2005). *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning)*. The MIT Press.
- [Riihimaki and Vehtari, 2010] Riihimaki, J. and Vehtari, A. (2010). Gaussian processes with monotonicity information. In *AISTATS*, volume 9 of *JMLR Proceedings*, pages 645–652. JMLR.org.
- [Robert, 1995] Robert, C. P. (1995). Simulation of truncated normal variables. *Statistics and Computing*, 5(2).
- [Robert and Casella, 2004] Robert, C. P. and Casella, G. (2004). *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag.
- [Rodriguez-Yam et al., 2004] Rodriguez-Yam, G., Davis, R. A., and Scharf, L. L. (2004). Efficient Gibbs Sampling of Truncated Multivariate Normal with Application to Constrained Linear Regression.
- [Roustant et al., 2012] Roustant, O., Ginsbourger, D., and Deville, Y. (2012). Dicekriging, diceoptim : Two r packages for the analysis of computer experiments by kriging-based metamodeling and optimization. *Journal of Statistical Software*, 51(1) :1–55.
- [Santner et al., 2003] Santner, T. J., Williams, B., and Notz, W. (2003). *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer-Verlag.
- [Schwartz, 1964] Schwartz, L. (1964). Sous-espaces d’espaces vectoriels topologiques et noyaux associés. (Noyaux reproduisants.). *J. Anal. Math.*, 13 :115–256.
- [Smith and Wilson, 2001] Smith, A. and Wilson, T. (2001). Fitting yield curves with long term constraints. Technical report, Technical report, Bacon and Woodrow.
- [Utreras and Varas, 1991] Utreras, F. and Varas, M. L. (1991). Monotone Interpolation of Scattered Data in \mathbb{R}^s . *Constructive Approximation, Springer-Verlag New York*, 7 :49–68.
- [Utreras, 1982] Utreras, F. I. (1982). Convergence rates for monotone cubic spline interpolation. *Journal of Approximation Theory*, 36(1) :86 – 90.

- [Villalobos and Wahba, 1987] Villalobos, M. and Wahba, G. (1987). Inequality-Constrained Multivariate Smoothing Splines with Application to the Estimation of Posterior Probabilities. *Journal of the American Statistical Association*, 82(397) :239–248.
- [Von Neumann, 1951] Von Neumann, J. (1951). Various Techniques Used in Connection with Random Digits. *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 12 :36–38.
- [Wolberg and Alf, 1999] Wolberg, G. and Alf, I. (1999). Monotonic cubic spline interpolation. In *Proceedings of Computer Graphics International*, pages 188–195.
- [Wolberg and Alf, 2002] Wolberg, G. and Alf, I. (2002). An energy-minimization framework for monotonic cubic spline interpolation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 143(2) :145 – 188.
- [Wright and Wegman, 1980] Wright, I. W. and Wegman, E. J. (1980). Isotonic, Convex and Related Splines. *The Annals of Statistics*, 8(5) :1023–1035.
- [Xiaojing, 2012] Xiaojing, W. (2012). *Bayesian Modeling Using Latent Structures*. PhD thesis, Duke University, Department of Statistical Science.
- [Xuming and Peide, 1996] Xuming, H. and Peide, S. (1996). Monotone B-spline Smoothing. *Journal of the American Statistical Association*, 93 :643–650.

BIBLIOGRAPHIE

École Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Étienne

NNT : 2015 EMSE 0791

Hassan MAATOUK

CORRESPONDENCE BETWEEN GAUSSIAN PROCESS REGRESSION AND INTERPOLATION SPLINES UNDER LINEAR INEQUALITY CONSTRAINTS. THEORY AND APPLICATIONS

Speciality : Applied Mathematics

Keywords : Gaussian Process Regression, Kriging, Bayesian Estimation, RKHS, Splines, Interpolation, Inequality Constraints, Uncertainty Quantification.

Abstract :

This thesis is dedicated to interpolation problems when the numerical function is known to satisfy some properties such as positivity, monotonicity or convexity.

Two methods of interpolation are studied. The first one is deterministic and is based on convex optimization in a Reproducing Kernel Hilbert Space (RKHS). The second one is a Bayesian approach based on Gaussian Process Regression (GPR) or Kriging. By using a finite linear functional decomposition, we propose to approximate the original Gaussian process by a finite-dimensional Gaussian process such that conditional simulations satisfy all the inequality constraints. As a consequence, GPR is equivalent to the simulation of a truncated Gaussian vector to a convex set. The mode or Maximum *A Posteriori* is defined as a Bayesian estimator and prediction intervals are quantified by simulation. Convergence of the method is proved and the correspondence between the two methods is done. This can be seen as an extension of the correspondence established by [Kimeldorf and Wahba, 1971] between Bayesian estimation on stochastic process and smoothing by splines. Finally, a real application in insurance and finance is given to estimate a term-structure curve and default probabilities.

École Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Étienne

NNT : 2015 EMSE 0791

Hassan MAATOUK

CORRESPONDANCE ENTRE RÉGRESSION PAR PROCESSUS GAUSSIEN ET SPLINES
D'INTERPOLATION SOUS CONTRAINTES LINÉAIRES DE TYPE INÉGALITÉ. THÉORIE ET
APPLICATIONS

Spécialité : Mathématiques Appliquées

Mots clefs : Régression par Processus Gaussien, Krigeage, Estimation Bayésienne,
Splines, Interpolation, Contraintes Inégalité, Quantification d'Incertitude.

Résumé :

On s'intéresse au problème d'interpolation d'une fonction numérique d'une ou plusieurs variables réelles lorsque qu'elle est connue pour satisfaire certaines propriétés comme, par exemple, la positivité, monotonie ou convexité.

Deux méthodes d'interpolation sont étudiées. D'une part, une approche déterministe conduit à un problème d'interpolation optimale sous contraintes linéaires inégalité dans un Espace de Hilbert à Noyau Reproductible (RKHS). D'autre part, une approche probabiliste considère le même problème comme un problème d'estimation d'une fonction dans un cadre bayésien. Plus précisément, on considère la Régression par Processus Gaussien ou krigeage pour estimer la fonction à interpoler sous les contraintes linéaires de type inégalité en question. Cette deuxième approche permet également de construire des intervalles de confiance autour de la fonction estimée. Pour cela, on propose une méthode d'approximation qui consiste à approcher un processus gaussien quelconque par un processus gaussien fini-dimensionnel. Le problème de krigeage se ramène ainsi à la simulation d'un vecteur gaussien tronqué à un espace convexe. L'analyse asymptotique permet d'établir la convergence de la méthode et la correspondance entre les deux approches déterministe et probabiliste, c'est le résultat théorique de la thèse. Ce dernier est vu comme une généralisation de la correspondance établie par [Kimeldorf and Wahba, 1971] entre estimateur bayésien et spline d'interpolation. Enfin, une application réelle dans le domaine de l'assurance (actuariat) pour estimer une courbe d'actualisation et des probabilités de défaut a été développée.