



HAL
open science

Régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme

Khader Khadraoui

► **To cite this version:**

Khader Khadraoui. Régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme. *Méthodologie [stat.ME]*. Université Montpellier 2 (Sciences et Techniques), 2011. Français. NNT: . tel-02805784

HAL Id: tel-02805784

<https://hal.inrae.fr/tel-02805784v1>

Submitted on 6 Jun 2020

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.

UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER II
-SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC-
THÈSE

Présentée pour obtenir le titre de :

Docteur en Sciences de l'Université de Montpellier II

Spécialité : MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

École Doctorale : INFORMATION, STRUCTURES ET SYSTÈMES

Formation Doctorale : BIOSTATISTIQUE

RÉGRESSION BAYÉSIENNE SOUS CONTRAINTES DE
RÉGULARITÉ ET DE FORME

par

KHADER KHADRAOUI

Soutenue publiquement le 08/12/2011 devant le jury composé de :

Président :	ANDRÉ	MAS	Professeur, Université Montpellier II
Directeur :	CHRISTOPHE	ABRAHAM	Professeur, Sup Agro Montpellier
Rapporteurs :	JUDITH	ROUSSEAU	Professeur, Université Paris Dauphine
	DENYS	POMMERET	Professeur, Université Aix-Marseille II
Examineurs :	JEAN-MICHEL	MARIN	Professeur, Université Montpellier II
	Pierre-André	CORNILLON	Maitre de conférence, Université Haute Bretagne

Remerciements

En présentant cette thèse, je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance à Christophe Abraham pour avoir accepté d'être mon directeur de thèse. Il m'a initié à l'analyse statistique bayésienne par son cours en Master Biostatistique et m'a encouragé dans cette aventure en donnant de leur temps pour m'encadrer. Son ouverture d'esprit et sa persévérance resteront pour moi un modèle. Il m'a appris, entre autres, que les discussions et échanges avec nos pairs sont certainement le plaisir essentiel en recherche...

Merci à Judith Rousseau et Denys Pommeret pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse et pour la pertinence de leurs remarques. L'attention qu'ils ont porté à ce travail est pour moi une récompense et un encouragement. Je leur en suis reconnaissant.

Je remercie André Mas pour avoir accepté de participer aux comités de suivie de ma thèse tout au long de ce travail et d'être dans le jury de la soutenance à la fin. Merci à Jean-Michel Marin et Pierre-André Cornillon pour avoir accepté de participer dans le jury de ma thèse.

Merci à Alain Rapaport et Pascal Neveu, les nouveaux directeurs du laboratoire, pour leurs réunions avec les doctorants et leur gentillesse en écoutant nos problèmes et en apportant leur soutien pour que les conditions de travail deviennent plus confortables. Leur générosité ne s'est jamais démentie durant ces trois années.

Ce fut un plaisir de travailler au laboratoire de Biométrie (actuellement l'UMR MISTEA), je remercie l'ensemble des hommes et des femmes du laboratoire pour leur gentillesse et leur bonne humeur. En particulier, un grand merci à Bénédicte Fontez pour la relecture d'un chapitre de cette thèse. J'associe à mes remerciements Véronique Sals-Vettorel qui m'a grandement facilité les tâches administratives et Philippe Naudin pour l'aide en informatique.

Enfin, je remercie en particulier les thésards qui pour la plupart n'en sont plus, Rémi Servien, Thomas Laloe, Mélanie Brun, Mohamed Sedki Amichtoh, Miled El Hajji, Ihab Haidar et Amine Charfi. Je leur dois beaucoup, ainsi qu'à tous ceux qui jusqu'à ce jour ont croisé ma route, ma famille, mes amis.

“La science n'est ni une voie simple ni une bonne option pour faire fortune. C'est un chemin difficile, qui exige beaucoup de conviction et de passion.”
[Ngô Bao Châu, médaille Fields 2010]

“ Nothing in nature is random.... A thing appears random only through the incompleteness of our knowledge.” [Baruch Benedictus de Spinoza (1632-1677)]

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Motivation	1
1.2	L'analyse statistique bayésienne	2
1.3	Problèmes des paramètres contraints	4
1.4	Présentation de la thèse	5
2	Les B-splines univariées et le polygone de contrôle	7
2.1	Introduction	7
2.2	Construction des B-splines univariées	9
2.2.1	Définition des fonctions B-splines univariées	9
2.2.2	Définition de la spline et les propriétés des B-splines univariées	12
2.2.3	Le polygone de contrôle : définition et construction	16
2.3	La convergence vers la spline	18
2.4	Quelques propriétés de la spline	19
2.4.1	L'enveloppe convexe	19
2.4.2	Insertion des nœuds	20
2.4.3	La variation de la spline	21
2.4.4	Diminution de la variation	27
2.5	Contrôle de la forme par le polygone de contrôle	28
3	La régression bayésienne sous contraintes	35
3.1	Introduction	35
3.2	Le modèle	38
3.3	Inférence bayésienne	39
3.3.1	La loi a priori	40
3.3.2	La loi a posteriori	41
3.3.3	Convergence du recuit simulé	44

3.3.4	Simulations par Metropolis-Hastings avec Gibbs	49
3.3.5	Convergence du Metropolis-Hastings avec Gibbs	50
3.3.6	Étude de simulation	53
3.4	Application à des mesures de pH (projet-Oxyred)	60
3.5	Discussion	66
4	Régression bayésienne avec B-splines à nœuds variables	71
4.1	Introduction	71
4.2	Le modèle de régression bayésienne	73
4.2.1	Le modèle hiérarchique complet	74
4.2.2	La spécification des priors	75
4.3	La régression bayésienne sans contraintes	77
4.3.1	Le calcul du ratio de vraisemblance	78
4.3.2	Schéma de simulation en absence de contraintes	80
4.4	Le problème de la régression sous contraintes	80
4.5	Le Metropolis-Hastings à sauts réversibles	85
4.5.1	Représentation constructive	86
4.5.2	Le problème de trans-dimensions dans la chaîne de simulation	87
4.5.3	Les types de mouvements et le choix entre splines	87
4.5.4	Étude théorique de la chaîne de simulation	91
4.6	Étude de simulation	91
4.7	Discussion	94
5	Régression bayésienne sous contraintes avec B-splines à nœuds variables	97
5.1	Introduction	98
5.2	Inférence bayésienne sous contraintes	99
5.2.1	Le modèle complet et le posterior	99
5.2.2	Simulation suivant la loi a posteriori	101
5.2.2.1	Calcul du rapport de prior sur les coefficients	101
5.2.2.2	Le choix des nœuds	105
5.2.2.3	Simulations par Metropolis-Hastings à sauts réversibles avec Gibbs	108
5.3	L'estimateur bayésien	111
5.3.1	L'approximation stochastique par Monte Carlo	112

5.3.2	Exemple	115
5.3.3	Calcul du mode a posteriori sous contraintes	116
5.4	Étude de simulation	117
5.4.1	La régression sous contrainte de monotonie	117
5.4.2	La régression sous contrainte d'unimodalité	120
5.5	Discussion	122
Bibliographie		124
Résumé		131

1

Introduction

1.1 Motivation

Lors de l'étude de la fabrication de fromages, des courbes d'acidification sont obtenues sous différentes conditions expérimentales au laboratoire INRA de Poligny, Jura (Jeanson et al., 2009). Sous des conditions idéales, les courbes obtenues doivent avoir certaines particularités : croissance, décroissance, valeurs comprises entre 2 valeurs connues, régularité, etc. Malheureusement, les appareils de mesures étant très sensibles et ils peuvent parfois produire des valeurs aberrantes pendant un intervalle de temps inconnu au cours de l'expérimentation ce qui produit ainsi des courbes bruitées et déformées. Il est donc important de disposer d'un outil statistique permettant de reconstruire ces courbes observées en tenant compte, d'une part, de l'information a priori connue sur la forme et la régularité et, d'autre part, des autres courbes observées sans déformation. L'analyse statistique bayésienne est un outil bien adapté au problème ci-dessus et à des problèmes connexes dans la mesure où elle permet de prendre en compte une information a priori (indépendante des observations) et de mettre à jour cette information a priori à partir des données observées.

1.2 L'analyse statistique bayésienne

Nous considérons un cadre bayésien pour appréhender les problèmes soulevés dans cette thèse. La théorie de l'analyse statistique bayésienne est caractérisée par une notion fondamentale qui consiste à traiter n'importe quelle quantité inconnue comme une variable aléatoire. Évidemment, on associe à cette variable aléatoire une distribution de probabilité. Des arguments solides préconisant l'analyse statistique bayésienne comme une approche d'inférence cohérente peuvent être trouvés dans Savage (1961), Cornfield (1967), de Finetti (1974), Lindley (1983) et Smith (1984).

Dans le contexte de cette thèse, il est souvent le cas que la fonction de régression inconnue f est décrite par un paramètre $\theta \in \Theta$. Le paradigme bayésien nécessite d'abord la considération d'une distribution a priori $p(\theta)$ qui reflète la croyance a priori sur ce paramètre puis l'observation des données \mathcal{D} et la spécification de la vraisemblance $p(\mathcal{D}|\theta)$ du modèle de régression. Une fois les données observées, une mise à jour sur la croyance a priori est exprimée, grâce au théorème de Bayes, dans la distribution a posteriori

$$p(\theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)}{\int_{\Theta} p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)d\theta}, \quad (1.1)$$

où $p(\mathcal{D}) = \int_{\Theta} p(\mathcal{D}, \theta)d\theta$ est la densité de la distribution marginale des observations \mathcal{D} . Le plus souvent, l'inférence bayésienne est concernée par l'estimation d'une fonction d'intérêt $g(\theta)$ en se référant à cette distribution a posteriori (1.1). Cette fonction d'intérêt peut être exprimée par le quotient de deux intégrales :

$$\mathbb{E}[g(\theta)|\mathcal{D}] = \frac{\int_{\Theta} g(\theta)p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)d\theta}{\int_{\Theta} p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)d\theta} = \frac{I_1}{I_2}. \quad (1.2)$$

Ici nous traitons les intégrales I_1 et I_2 en considérant que Θ est un ouvert de \mathbb{R}^d , d est la dimension de θ et g est une fonction intégrable sur Θ . Les intégrations I_1 et I_2 dans (1.2) s'avèrent souvent incalculables et l'expression explicite de la densité a posteriori (1.1) est obtenue à une constante d'intégration près. En particulier, pour résoudre les challenges de l'analyse bayésienne on peut recourir à des approximations numériques. Les méthodes proposées dans ce contexte sont essentiellement basées sur des simulations suivant la loi a posteriori ou des approximations stochastiques. Parmi ces outils, on peut citer à titre d'exemples l'approximation quadratique itérative (méthode de Newton), l'approximation de Laplace (Tierney and Kadane, 1986) et récemment les méthodes de Monte Carlo pour l'intégration (Robert and Casella, 2004). Les méthodes de Monte Carlo désignent toute

méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes.

En posant par $\pi(\boldsymbol{\theta})$ la distribution a posteriori $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D})$, l'expression (1.2) qu'on cherche à évaluer peut s'écrire

$$\mathbb{E}\left[g(\boldsymbol{\theta})\right] = \int_{\Theta} g(\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta} = I. \quad (1.3)$$

L'idée de ces méthodes de Monte Carlo consiste à estimer I en utilisant la loi forte des grands nombres. Il s'agit alors de produire un échantillon $\boldsymbol{\theta}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}^{(T)}$ en simulant aléatoirement suivant π et d'approcher I par la moyenne empirique

$$\mathbb{E}\left[g(\boldsymbol{\theta})\right] \approx \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T g\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right), \quad (1.4)$$

où l'erreur commise est contrôlée par le théorème central limite dès que $g(\boldsymbol{\theta})$ est de carré intégrable (dans $L^2(\Theta)$). Il ne faut pas perdre de vue que la méthode de Monte Carlo converge lentement mais sa vitesse de convergence est insensible à la dimension (ce qui la rend efficace en dimensions assez grandes) ainsi qu'à la régularité de la fonction g .

Ainsi, le problème de l'évaluation d'une intégrale multidimensionnelle compliquée revient à résoudre un problème de génération d'un échantillon aléatoire à partir d'une distribution de probabilité multidimensionnelle complexe. Simuler un échantillon de réalisations indépendantes directement à partir de la distribution π pourrait être un problème difficile mais ce n'est pas strictement nécessaire. Il suffit de simuler un échantillon $\boldsymbol{\theta}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}^{(T)}$ à partir d'une chaîne de Markov irréductible et apériodique sur Θ et de distribution stationnaire π . Dans la littérature, des descriptions de méthodes permettant de construire des chaînes de Markov appropriées et de distribution stationnaire π sont données par exemple dans Besag and Green (1993), Smith and Roberts (1993) et Tierney (1994). Un outil simple et adapté à un cadre général de simulation utilisant une chaîne de Markov par Monte Carlo (MCMC) est l'algorithme de Metropolis-Hastings (Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970). On cite également l'échantillonneur de Gibbs (Geman and Geman, 1984) qui se présente comme un cas particulier de l'algorithme de Metropolis-Hastings. Lorsque il s'agit d'un problème de dimension variable pour le paramètre $\boldsymbol{\theta}$ (d est un paramètre inconnu), les simulations suivant la loi a posteriori π peuvent être réalisées par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles (Green, 1995). Cette méthode à sauts réversibles assure des déplacements entre des espaces de dimensions différentes dans la chaîne de simulation.

1.3 Problèmes des paramètres contraints

Pour les modèles bayésiens hiérarchiques, le fait d'imposer une (ou plusieurs) contrainte sur un (ou plusieurs) paramètre contribue à rendre l'analyse bayésienne complexe. En présence d'une contrainte, l'implémentation par Metropolis-Hastings ou l'échantillonneur de Gibbs des simulations suivant la densité a posteriori, qu'on obtient analytiquement à une constante d'intégration près, devient difficile. Gelfand et al. (1992) ont précisé que ce problème de paramètre sous contrainte apparaît dans une grande variété d'applications : les essais biologiques, la graduation actuarielle, les données catégorielles ordinales, le développement des tests de fiabilité, etc. Ils ont montré dans leur travail que l'implémentation des calculs bayésiens en présence d'une contrainte se fait systématiquement grâce aux simulations par une méthode MCMC. Pour exposer clairement le problème, on prend $\boldsymbol{\theta}^c$ un paramètre sous contrainte de dimension d_1 et $\boldsymbol{\lambda}$ un paramètre de nuisance dans le modèle de dimension d_2 . Soit la distribution a posteriori de la forme

$$\pi(\boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda} | \mathcal{D}) = \frac{1}{C} \times p(\mathcal{D} | \boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda}) \times p(\boldsymbol{\theta}^c | \boldsymbol{\lambda}) \mathbf{1}_{\{\boldsymbol{\theta}^c \in \Theta^c\}} \times p(\boldsymbol{\lambda}) \mathbf{1}_{\{\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda\}}, \quad (1.5)$$

où la fonction indicatrice $\mathbf{1}_{\{\boldsymbol{\theta}^c \in \Theta^c\}} = 1$ si $\boldsymbol{\theta}^c \in \Theta^c$ et 0 sinon, $p(\boldsymbol{\theta}^c | \boldsymbol{\lambda})$ est une densité a priori sous contrainte pour le paramètre $\boldsymbol{\theta}^c$ et $p(\boldsymbol{\lambda})$ est une densité a priori sans contrainte pour le paramètre $\boldsymbol{\lambda}$. Dans (1.5), l'espace sous contrainte Θ^c est un sous ensemble de \mathbb{R}^{d_1} qui peut, ou non, dépendre des données suivant la nature du problème et $\Lambda \subset \mathbb{R}^{d_2}$ est le support de $p(\boldsymbol{\lambda})$. Le support de la densité a posteriori $\pi(\boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda} | \mathcal{D})$ est donné par

$$\Omega = \Theta^c \otimes \Lambda = \left\{ (\boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda}) : \boldsymbol{\theta}^c \in \Theta^c \text{ et } \boldsymbol{\lambda} \in \Lambda \right\}, \quad (1.6)$$

et ainsi la constante de normalisation C est donnée par

$$C = \int_{\Omega} p(\mathcal{D} | \boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda}) p(\boldsymbol{\theta}^c | \boldsymbol{\lambda}) p(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\theta}^c d\boldsymbol{\lambda}. \quad (1.7)$$

Si on n'a pas la contrainte, la densité a priori $p(\boldsymbol{\theta} | \boldsymbol{\lambda})$ du paramètre $\boldsymbol{\theta}$ est complètement connue ($\int_{\mathbb{R}^{d_1}} p(\boldsymbol{\theta} | \boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\theta} = 1$). Le calcul analytique de C n'est généralement pas disponible ce qui fait que l'analyse bayésienne est très complexe. Comme souligné par Gelfand et al. (1992), simuler directement suivant $\pi(\boldsymbol{\theta}^c, \boldsymbol{\lambda} | \mathcal{D})$ est presque impossible. Par conséquent, l'algorithme de Metropolis-Hastings et l'échantillonneur de Gibbs peuvent être appliqués. En particulier, l'étape de proposition du Metropolis-Hastings doit garantir la vérification de la contrainte ce qui peut être parfois coûteux lorsque la contrainte est très compliquée.

1.4 Présentation de la thèse

Le sujet de cette thèse est la régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme. Les travaux autour de la régression sous contraintes sont assez nombreux en statistique fréquentiste. Pour une description des principales méthodes non paramétriques classiques, nous pourrions consulter Delecroix and Thomas-Agnan (2000). Les méthodes proposées concernent souvent la régression isotonique et ne semblent pas pouvoir s'adapter simplement à des contraintes de forme plus sophistiquées que la simple condition de monotonie. D'ailleurs, ces méthodes n'intègrent pas simultanément les contraintes de régularité et de forme mais se décomposent souvent en deux étapes : le lissage pour satisfaire la contrainte de régularité et l'isotonisation pour satisfaire la contrainte de monotonie. En statistique bayésienne, les travaux sont rares et relativement récents (Gelfand and Kuo, 1991; Ramgopal et al., 1993; Lavine and Mockus, 1995; Holmes and Heard, 2003; Neelon and Dunson, 2004; Gunn and Dunson, 2005; Shively and Sager, 2009). Comme dans le cadre fréquentiste, ils concernent surtout la régression isotonique.

La régression bayésienne permet de prendre en compte de façon simultanée les contraintes de régularité et de forme. Il suffit, en effet, de placer une loi a priori sur l'ensemble des courbes respectant les deux types de contraintes. Dans cette thèse, on propose l'utilisation des B-splines pour obtenir une régression lisse. Contrôler la forme de la spline engendrée par la base de B-spline constitue une première difficulté à résoudre. La distribution a posteriori étant absolument continue par rapport à la distribution a priori, les contraintes seront prises en compte de manière automatique dans l'inférence. Pour générer suivant la distribution a posteriori, on utilise un algorithme de type Metropolis-Hastings dont l'étape de proposition garantit la vérification de la contrainte de forme. La construction d'une distribution conditionnelle qui respecte la contrainte de forme pour l'étape de proposition constitue une deuxième difficulté à résoudre. La fonction de régression sera estimée par le mode a posteriori car l'espérance a posteriori ne vérifie pas nécessairement les contraintes de forme. Le calcul numérique du mode a posteriori peut être effectué par un algorithme de type recuit simulé dont le principe rejoint celui de l'algorithme de type Metropolis-Hastings.

Les résultats concernent les objectifs suivants :

- contrôler la forme de la spline engendrée par une base de B-spline grâce au polygone de contrôle pour différentes contraintes : monotonie, convexité, unimodalité, etc (chapitres 2, 3, 4 et 5).

- proposer un estimateur bayésien d’une fonction de régression sous contraintes de régularité et de forme (chapitre 3).
- approfondir l’étude de la régression sous contraintes en utilisant les B-splines à nœuds variables et améliorer l’estimation bayésienne de la fonction de régression (chapitres 4 et 5).

Le plan par chapitre est le suivant. Le chapitre 2 propose des résultats permettant de contrôler la forme de la spline engendrée par la base de B-spline : la préservation de la κ -monotonie et en particulier de l’unimodalité sont démontrées pour la spline et le polygone de contrôle. Ce chapitre 2 est plutôt un synthèse théorique qui trouve sa justification pratique dans le chapitre 3 qui s’attaque au problème concret de la reconstruction des courbes déformées d’acidification. Le chapitre 3 propose un estimateur bayésien d’une fonction de régression sous contraintes de forme et de régularité. Le chapitre 4 aborde une technique permettant de résoudre le problème des contraintes de forme indirectement quand les nœuds de la base de B-spline sont variables. Le chapitre 5 étudie un modèle Multinomial-Dirichlet permettant de varier le nombre et la position des nœuds pour traiter le problème de la régression à nœuds variables en présence de contraintes de forme.

Indication La lecture de chaque chapitre de la thèse ne nécessite pas la lecture préalable des autres chapitres. Les notations utilisées sont définies lors de leur première utilisation.

2

Les B-splines univariées et le polygone de contrôle

Résumé : L'objet de ce chapitre est d'étudier les fonctions B-splines univariées. On s'intéresse précisément à rappeler la définition des B-splines, à donner leurs propriétés et à définir le polygone de contrôle. En particulier, à chaque spline est associée une courbe linéaire par morceaux (polygone de contrôle) qui détermine ses variations. En utilisant le polygone de contrôle, nous démontrons que la forme d'une spline engendrée par une base de B-spline est contrôlée par un ensemble de points de contrôle qui ne sont pas situés sur la courbe de la spline. De manière concise, nous exprimons explicitement quelques contraintes de forme pour la spline (monotonie, concavité, convexité, unimodalité, etc) en fonction des coefficients de la spline.

2.1 Introduction

Les B-splines univariées sont des fonctions polynomiales par morceaux à support compact. Ces fonctions sont définies par un ordre k et une séquence de nœuds. Les nœuds représentent les abscisses des points de jonction des morceaux de polynômes. La spline est tout simplement une combinaison linéaire des fonctions B-splines par des coefficients réels appelés coefficients de la spline.

L'étude des splines a connu un développement à partir de 1946 avec I. J. Schoenberg qui

utilise pour la première fois le terme "fonction-spline". Historiquement, on peut remarquer que la littérature qui concerne le sujet des splines se divise en deux périodes. Dans la première période, seulement les propriétés des fonctions polynomiales par morceaux sont étudiées. Dans la deuxième période, les recherches sont plutôt consacrées à traiter les fonctions des splines de lissage comme étant la solution unique d'un problème d'optimisation dans un espace de Hilbert (Laurent, 1972). En statistique, différents types de bases sont utilisés : les fonctions à puissances tronquées, les splines cubiques naturelles (Green and Silverman, 1994), la base de B-spline (Eilers and Marx, 1996), les fonctions à bases radiales (Ripley, 1995), etc. Eilers and Marx (1996) ont montré que la base de B-spline a de très bonnes propriétés de stabilité numérique par rapport aux fonctions à puissances tronquées. Dans ce chapitre, on s'intéresse à la base de B-spline et particulièrement au résumé proposé par de Boor (2001) qui contient l'essentiel sur les B-splines.

Le sujet des B-splines est d'importance extrême sur les plans théoriques et numériques. Pour cette raison, nous avons pensé qu'il convenait de rappeler la définition en utilisant la relation des différences divisées et présenter les propriétés des fonctions B-splines. Le calcul des B-splines à partir de la relation des différences divisées permet d'avoir des relations de récurrence faciles à programmer. Une fois la base de B-spline calculée, nous dérivons la spline et nous montrons qu'il est possible de contrôler la forme de cette spline par ce qu'on appelle le polygone de contrôle. Nous définissons le polygone de contrôle à partir de l'ordre k et les nœuds de la spline. Le polygone de contrôle est une fonction linéaire par morceaux qui interpôle les points de contrôle déterminés à partir des nœuds et les coefficients de la spline. Une étude de la variation de la spline en fonctions de ses coefficients est proposée également. Nous démontrons par récurrence comment obtenir les dérivées nième de la spline sous l'hypothèse d'équidistance des nœuds. Nous utilisons ces dérivées pour imposer des conditions suffisantes sur les coefficients de la spline afin de vérifier les contraintes de monotonie et de concavité.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans une première partie, nous présentons les principaux concepts des fonctions B-splines et le polygone de contrôle. Une attention particulière est attachée à l'importance du polygone de contrôle pour ajuster la tendance de la spline. Dans une deuxième partie, nous abordons les spécificités de l'étude de la spline sous contraintes de forme. Dans cette perspective, après avoir dérivé la spline à partir de la base de B-spline et des coefficients, nous exprimons explicitement certaines contraintes de forme (monotonie, unimodalité, convexité).

2.2 Construction des B-splines univariées

Dans cette section, on considère la méthode d'approximation par B-splines. On s'intéresse précisément à définir les B-splines, à donner leurs propriétés et à définir le *polygone de contrôle*. Pour un exposé détaillé sur les B-splines, on pourra consulter de Boor (2001). Principalement, le but se résume à comprendre comment la forme d'une courbe est contrôlée par un ensemble de points de contrôle qui ne sont pas situés sur celle-ci. Nous cherchons également à étudier quelques contraintes de forme pour la fonction de régression.

Certaines notations dans cette section se présentent comme suit : nous utilisons $D^r f$ (au lieu de $f^{(r)}$) pour noter la r^e dérivée de f , Π_r pour noter la collection des polynômes de degré $\leq r$, et $\Pi_{<r}$ pour noter la collection des polynômes de degré strictement inférieur à r (i.e., d'ordre r).

2.2.1 Définition des fonctions B-splines univariées

Rappelons brièvement les principales définitions des fonctions B-splines d'ordre k sur lesquelles s'appuiera l'approche bayésienne de l'estimation de la fonction de régression inconnue f . On se donne une suite de points $\{t_i \in \mathbb{R} | t_i \leq t_{i+1}\}$, appelés *nœuds*. Le vecteur $\mathbf{t} \stackrel{\text{déf}}{=} (t_i)$ est appelé le vecteur nodal et certains de ces nœuds peuvent être confondus. Dans le cas où ℓ nœuds sont égaux à un réel α , on dit que α est de multiplicité ℓ . On définit la B-spline à l'ordre 1 par :

$$B_{i1}(t) \stackrel{\text{déf}}{=} X_i(t) \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{cases} 1 & \text{si } t_i \leq t < t_{i+1}, \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases} \quad (2.1)$$

On note que cette fonction est continue à droite. On remarque au passage que les B-splines d'ordre 1 forment une partition de l'unité :

$$\sum_i B_{i1}(t) = 1, \text{ pour tout } t \text{ (dans le cas où } t_i = t_{i+1}, \text{ alors } B_{i1} = X_i = 0).$$

À partir des B-splines de premier ordre, découlent toutes les B-splines d'ordres supérieurs par récurrence.

Définition 2.2.1 On définit, par récurrence sur k , les fonctions B-splines $B_{i,k}$ par la relation de Cox-de Boor suivante :

$$B_{i,k}(t) = \omega_{i,k}(t) B_{i,k-1}(t) + \left(1 - \omega_{i+1,k}(t)\right) B_{i+1,k-1}(t), \quad (2.2)$$

où la fonction $\omega_{i,k}$ est définie par

$$\omega_{i,k}(t) = \begin{cases} \frac{t-t_i}{t_{i+k-1}-t_i} & \text{si } t_i < t_{i+k-1}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Partant de cette définition, les fonctions B-splines sont des polynômes de degré inférieur à k sur chaque intervalle $[t_i, t_{i+1}[$ et de classe $C^{k-1-\ell}$ au voisinage de chaque nœud de multiplicité ℓ . La B-spline d'ordre 2 est donnée par :

$$B_{i,2}(t) = \omega_{i,2}(t)X_i(t) + (1 - \omega_{i+1,2}(t))X_{i+1}(t), \quad (2.4)$$

ce qui consiste à joindre deux droites de manière à obtenir une fonction continue linéaire par morceaux qui s'annule à l'extérieur de l'intervalle $[t_i, t_{i+2}[$. Pour cette raison $B_{i,2}$ est nommée la B-spline linéaire.

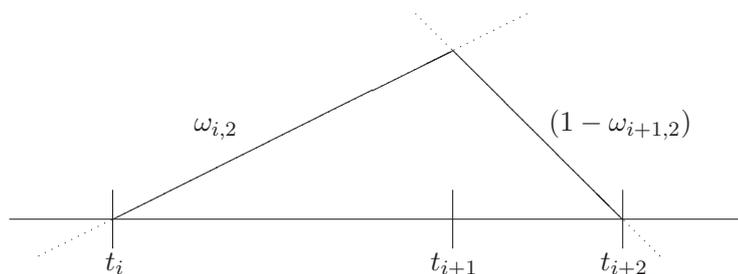


Figure 2.1 – Les deux fonctions de pondération $\omega_{i,2}$ et $(1 - \omega_{i+1,2})$ (trait pointillé), et B-spline linéaire (trait plein).

La B-spline d'ordre 3 est donnée par :

$$\begin{aligned} B_{i,3} &= \omega_{i,3}B_{i,2} + (1 - \omega_{i+1,3})B_{i+1,2} \\ &= \omega_{i,3}\omega_{i,2}X_i + \left(\omega_{i,3}(1 - \omega_{i+1,2}) + \omega_{i+1,2}(1 - \omega_{i+1,3})\right)X_{i+1} \\ &\quad + (1 - \omega_{i+1,3})(1 - \omega_{i+2,2})X_{i+2}, \end{aligned}$$

ce qui montre que la fonction $B_{i,3}$ est constituée de 3 morceaux quadratiques qui se joignent d'une manière lisse aux niveaux des nœuds pour former une fonction quadratique par morceaux de classe C^1 qui s'annule à l'extérieur de l'intervalle $[t_i, t_{i+3}[$.

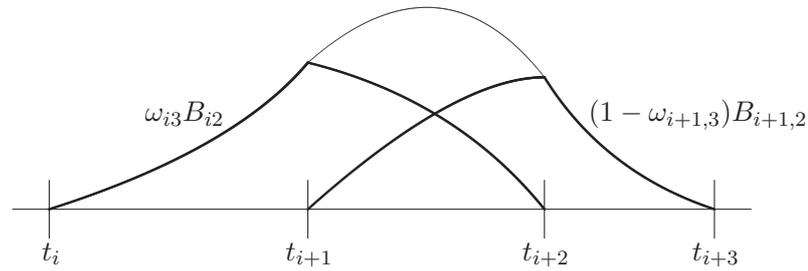


Figure 2.2 – Les deux fonctions $\omega_{i3}B_{i2}$ et $(1 - \omega_{i+1,3})B_{i+1,2}$ (montrant 2 points de rebroussement) et leur somme la B-spline B_{i3} .

Ce même raisonnement donne, après $(k - 1)$ étapes de récurrence, la relation pour la fonction B_{ik} de la forme :

$$B_{ik} = \sum_{j=i}^{i+k-1} b_{jk} X_j, \quad (2.5)$$

où chaque b_{jk} est un polynôme de degré $< k$ (exactement tout les b_{jk} sont de degré $k - 1$). Ainsi, la B-spline d'ordre k est une fonction composée de morceaux de polynômes de degrés $< k$ qui s'annule à l'extérieur de $[t_i, t_{i+k}[$. En particulier, la fonction B_{ik} vaut effectivement zéro si $t_i = t_{i+k}$.

On en déduit également que B_{ik} est positive dans l'intervalle $]t_i, t_{i+k}[$ étant donné que les fonctions de pondération ω_{ik} et $(1 - \omega_{i+1,k})$ sont toujours positives dans cet intervalle (cf. Figure 2.3).

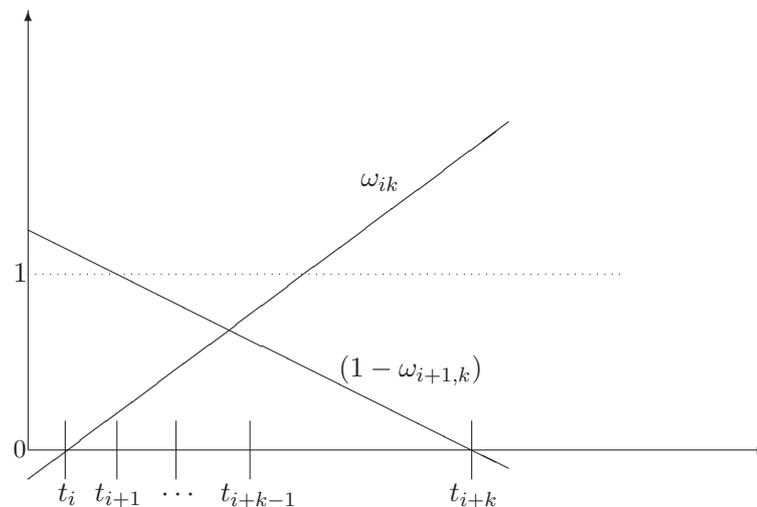


Figure 2.3 – Les deux fonctions de pondération ω_{ik} et $(1 - \omega_{i+1,k})$ sont positives dans l'intervalle $]t_i, t_{i+k}[$.

Une des raisons du succès des B-splines est le fait qu'en plus de la qualité d'ajustement, elles sont éléments d'un espace vectoriel de dimension finie lorsqu'on fixe le nombre de nœuds.

2.2.2 Définition de la spline et les propriétés des B-splines univariées

La base B-spline ainsi définie, sert dans notre méthode à engendrer une spline. La spline d'ordre k et de séquence nodale \mathbf{t} , est par définition, une combinaison linéaire des B-splines B_{ik} associées à la séquence \mathbf{t} . On note l'ensemble de ces splines par :

$$S_{k,\mathbf{t}} \stackrel{\text{déf}}{=} \left\{ \sum_i B_{ik} \beta_i : \beta_i \in \mathbb{R} \right\}. \quad (2.6)$$

En ce qui concerne la nature du vecteur nodal \mathbf{t} , on précise qu'il s'agit d'une séquence réelle croissante. Dans des situations pratiques, \mathbf{t} est nécessairement une séquence finie. Chaque $s \in S_{k,\mathbf{t}}$ est un polynôme par morceaux de degré $< k$ ($S_{k,\mathbf{t}} \subseteq \Pi_{<k}$) où \mathbf{t} est la séquence des points de rupture. L'ensemble des fonctions B-splines d'ordre k définies sur la séquence de nœuds \mathbf{t} constituent une base de l'espace des splines. Un exemple de l'utilisation des B-splines dans le contexte de la régression est proposé dans la Figure 2.4 : la base a été obtenue en utilisant un ordre $k = 4$ et en choisissant 2 nœuds pour construire \mathbf{t} . On précise au passage que pour la construction d'une base B-spline il est nécessaire d'ajouter $2k$ nœuds supplémentaires aux nœuds fixés de la séquence \mathbf{t} . Pour leurs positions, on place k nœuds à droite de $\max(\mathbf{t})$ et k nœuds à gauche de $\min(\mathbf{t})$ (Kochevar, 1974). Ainsi, on obtient $\#\mathbf{t} + k$ fonctions B-spline dans la base (Chambers, 2008).

La combinaison linéaire de ces fonctions B-splines définit la fonction spline qui va servir à l'approximation de la fonction de régression inconnue f . La dimension de la base ainsi construite dépend de la multiplicité imposée en chaque nœud. Le lissage d'une spline $s \in S_{k,\mathbf{t}}$ est en dépendance directe également avec la multiplicité des nœuds. On rappelle que la multiplicité des nœuds est :

$$\#t_i \stackrel{\text{déf}}{=} \#\{t_j : t_i = t_j\}.$$

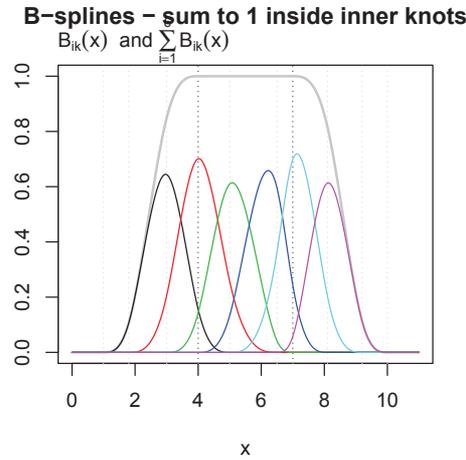


Figure 2.4 – Base de B-spline B_{i4} : 8 nœuds extérieurs $(1.0, 1.8, 3.0, 4.0, 7.0, 8.1, 9.2, 10.0)'$ et 2 nœuds intérieurs $\mathbf{t} = (5.0, 6.5)'$. La somme $\sum_{i=1}^6 B_{i4}(x)$ est en gris.

Théorème 2.2.2 (de Boor (2001)) *L'espace $S_{k,\mathbf{t}}$ est un espace de fonctions polynomiales par morceaux de degré $< k$ et de points de rupture t_i . Un élément de $S_{k,\mathbf{t}}$ est de classe $C^{k-1-\#t_i}$ à chaque nœud t_i .*

La multiplicité des nœuds sert essentiellement à mieux contrôler la régularité de la spline. D'ailleurs, le fait d'introduire des nœuds multiples dans la base B-spline fait perdre à la spline un degré de dérivabilité (un ordre de régularité). En considérant une spline d'ordre $k = 4$ par exemple, alors si on double un nœud, la spline aura seulement une dérivée première continue alors que si on le triple, elle sera simplement continue. Pour plus de détails sur la preuve du théorème 2.2.2, on pourra se reporter à de Boor (2001).

Dans la suite, on présente le théorème de Marsden et nous nous intéressons à discuter son utilisation pour comprendre le lien entre la spline et son polygone de contrôle. Pour des raisons de simplicité, nous supposons que la séquence \mathbf{t} n'est pas finie (sauf indication contraire). On pose les hypothèses suivantes :

H : (i) on suppose que $\lim_{i \rightarrow \pm\infty} t_i = \pm\infty$,

(ii) on suppose que $t_i < t_{i+k}$ pour tout i ($B_{ik} \neq 0$ pour tout i),

et l'hypothèse

H' : $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_{m_k-k})'$.

On précise au passage qu'en utilisant une séquence \mathbf{t} infinie de nœuds, la somme $\sum_i B_{ik}(t)\beta_i$ est finie pour t fixé car le support des B-splines B_{ik} est fini. Partant d'une séquence fini

de nœuds, la construction d'une séquence infinie s'obtient tout simplement en ajoutant une infinité de nœuds à la séquence finie (à droite et à gauche) et en choisissant des coefficients supplémentaires nuls ($\beta_i = 0$).

Théorème 2.2.3 (Egalité de Marsden) *Quelque soit le réel τ et sous **H** :*

$$(\cdot - \tau)^{k-1} = \sum_i B_{ik}(\cdot) \psi_{ik}(\tau), \quad (2.7)$$

où

$$\psi_{ik}(\tau) \stackrel{\text{déf}}{=} (t_{i+1} - \tau) \cdots (t_{i+k-1} - \tau). \quad (2.8)$$

Dans la combinaison linéaire (2.7), on remarque que le polynôme $(\cdot - \tau)^{k-1}$ peut s'écrire sous la forme d'une spline. Le réel τ est choisi arbitrairement. La supposition (i) dans l'hypothèse **H** assure que chaque $\tau \in \mathbb{R}$ appartient à un support d'une certaine B-spline. Pour plus de détails, la preuve de théorème 2.2.3 figure dans de Boor (2001).

Cette égalité de Marsden est d'une importance extrême dans la détermination des positions de points de contrôle. En effet, en divisant l'égalité (2.7) par $(k-1)!$ et en dérivant $(\mu-1)$ fois par rapport à τ , on obtient :

$$\frac{(\cdot - \tau)^{k-\mu}}{(k-\mu)!} = \sum_i B_{ik}(\cdot) \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(\tau)}{(k-1)!}, \quad (2.9)$$

où on rappelle que Dg est la dérivée de la fonction g . D'après la formule de Taylor, on peut exprimer un polynôme p en fonction de ses dérivées de la manière suivante :

$$p(\cdot) = \sum_{\mu=1}^k \frac{(\cdot - \tau)^{k-\mu}}{(k-\mu)!} D^{k-\mu} p(\tau),$$

qui reste valide pour tout $p \in \Pi_{<k}$. Ainsi, en utilisant l'égalité (2.9), ce polynôme p vérifie la relation :

$$\begin{aligned} p(\cdot) &= \sum_{\mu=1}^k \sum_i B_{ik}(\cdot) \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} p(\tau) \\ &= \sum_i B_{ik}(\cdot) \sum_{\mu=1}^k \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} p(\tau). \end{aligned}$$

Nous introduisons la fonction λ_{ik} qui sera définie par :

$$\lambda_{ik}p \stackrel{\text{déf}}{=} \sum_{\mu=1}^k \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} p(\tau). \quad (2.10)$$

Alors, le polynôme p devient tout simplement :

$$p(\cdot) = \sum_i B_{ik}(\cdot) \lambda_{ik} p.$$

Il est facile de vérifier que $D^{k-1} \psi_{ik} = (-1)^{k-1} (k-1)!$. Quand $p = 1$, alors on aura $\sum_i B_{ik} = 1$ (la partition de l'unité). Ce résultat s'obtient directement en remarquant que dans la relation (2.10) $D^{k-\mu} p(\tau) = 1$ si $\mu = k$ et $D^{k-\mu} p(\tau) = 0$ si $1 \leq \mu < k$ étant donnée que $p = 1$. C'est ce qui donne $\lambda_{ik} p = 1$ si $p = 1$.

Également, $D^{k-2} \psi_{ik}$ est un polynôme linéaire, cela peut se vérifier à partir de :

$$\begin{aligned} D^{k-2} \psi_{ik}(\tau) &= D^{k-2} \left[(t_{i+1} - \tau) \cdots (t_{i+k-1} - \tau) \right] \\ &= (-1)^{k-1} \tau (k-1)! + (-1)^{k-2} (t_{i+1} + \cdots + t_{i+k-1}) (k-2)!. \end{aligned}$$

Au passage on peut vérifier aussi que $D^{k-2} \psi_{ik}(\tau)$ s'annule en :

$$t_i^* \stackrel{\text{déf}}{=} (t_{i+1} + \cdots + t_{i+k-1}) / (k-1), \quad (2.11)$$

ce qui donne l'égalité importante suivante qui va servir plus tard dans la construction du polygone de contrôle :

$$p(\cdot) = \sum_i B_{ik}(\cdot) p(t_i^*), \quad \text{pour tout } p \in \Pi_1. \quad (2.12)$$

Pour mieux comprendre l'obtention de l'égalité (2.12), on remarque que l'égalité (2.10) ne dépend pas de τ (le réel τ est à choisir arbitrairement). Si $p \in \Pi_1$, alors en prenant $\tau = t_i^*$, la fonction λ_{ik} devient :

$$\lambda_{ik} p = \sum_{\mu=k-1}^k \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(t_i^*)}{(k-1)!} D^{k-\mu} p(t_i^*) = p(t_i^*).$$

Remarque Pour tout $t \in [t_i, t_{i+k}[$, lorsque la fonction $B_{ik}(t)$ s'écarte de l'axe des abscisses, la fonction $\psi_{ik}(t)$ se rapproche de la valeur zéro comme on peut le voir pour l'exemple B_{i4} et ψ_{i4} dans la figure 2.5.

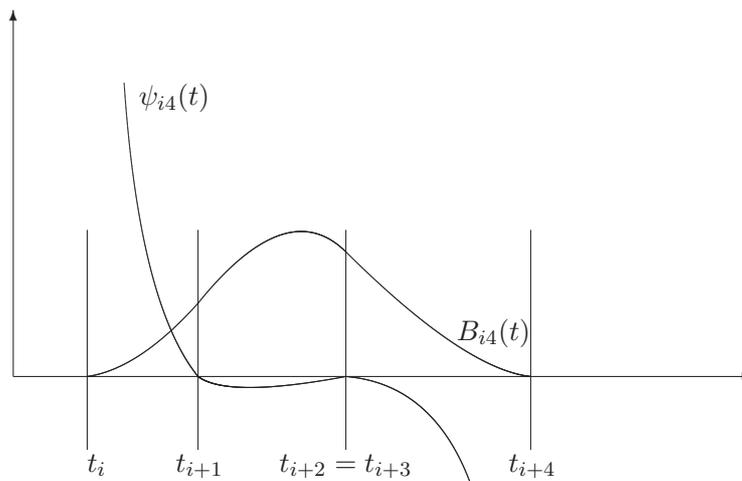


Figure 2.5 – La B-spline $B_{i4}(t)$ et $\psi_{i4}(t)$; cas d'un nœud double $t_{i+2} = t_{i+3}$.

D'une manière générale, les propriétés des fonctions B-splines se résument aux principaux points suivants :

- (i) la fonction B_{ik} est un polynôme de degré $< k$ sur chaque intervalle $[t_i, t_{i+1}[$;
- (ii) la fonction B_{ik} s'annule en dehors de son support $[t_i, t_{i+k}[$;
- (iii) la fonction B_{ik} s'annule aussi si $t_i = t_{i+1} = \dots = t_{i+k}$ et dans ce cas, pour tout $t \in \mathbb{R}$, on aura $B_{ik}(t) = 0$;
- (iv) pour tout $t \in [t_i, t_{i+k}[$, $0 \leq B_{ik}(t) \leq 1$;
- (v) sur l'intervalle $]t_i, t_{i+k}[$, la fonction B_{ik} ne prend la valeur 1 que dans le cas où $t_{i+1} = \dots = t_{i+k}$ et en ce point seulement;
- (vi) partition de l'unité : pour tout $t \in \mathbb{R}$ on a

$$\sum_i B_{ik}(t) = 1;$$

- (vii) différentiabilité : la fonction B_{ik} est C^∞ à droite de chaque nœud;
- (viii) au voisinage d'un nœud de multiplicité ℓ , la fonction B_{ik} est seulement de classe $C^{k-1-\ell}$.

2.2.3 Le polygone de contrôle : définition et construction

Dans la section précédente, on a défini le vecteur nodal \mathbf{t} . Le polygone de contrôle est défini ci-dessous.

Définition 2.2.4 Le polygone de contrôle associé à la spline $s_k = \sum_i B_{ik}\beta_i$ est la fonction linéaire par morceaux qui interpole les sommets P_i définis par :

$$P_i \stackrel{\text{déf}}{=} (t_i^*, \beta_{i-1}), \quad (2.13)$$

où t_i^* est défini par (2.11). On note par $C_{\beta, \mathbf{t}}$ le polygone de contrôle.

Les points $P_i \in \mathbb{R}^2$ sont appelés *points de contrôle*.

Remarques (i) D'après la définition 2.2.4, le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est une spline d'ordre 2 qui s'écrit :

$$C_{\beta, \mathbf{t}}(t) \stackrel{\text{déf}}{=} \left(1 - \frac{t - t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta_{i-1} + \left(\frac{t - t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta_i, \quad \text{pour } t_i^* \leq t < t_{i+1}^*.$$

Dans le cas où $t_i^* = t_{i+1}^*$, le sommet P_i est tout simplement ignoré. Le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est une spline définie sur le vecteur nodal $\mathbf{t}^* \stackrel{\text{déf}}{=} (t_i^*)$. Alors, le polygone s'obtient de la façon suivante : on passe une ligne polygonale par les points (t_i^*, β_{i-1}) de manière à ce que si t varie entre deux nœuds t_i^* et t_{i+1}^* on décrit le segment $[(t_i^*, \beta_{i-1}), (t_{i+1}^*, \beta_i)]$ avec une pente constante. Si $t_i^* < t_{i+1}^*$, pour tout i , on peut écrire le polygone autrement :

$$C_{\beta, \mathbf{t}}(t) = \sum_i \mathbf{1}_{[t_i^*, t_{i+1}^*]} \left[\left(1 - \frac{t - t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta_{i-1} + \left(\frac{t - t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta_i \right],$$

où $\mathbf{1}_A$ désigne la fonction indicatrice de l'ensemble A . La courbe obtenue est continue mais non dérivable.

(ii) Les splines de Bézier représentent un cas particulier des splines engendrées par une base B-spline. Par définition, la spline de Bézier S^B est une combinaison linéaire des polynômes de Bernstein B_i^d . Pour un degré d , il y a $d+1$ polynômes de Bernstein B_0^d, \dots, B_d^d définis sur l'intervalle $[0,1]$ par $B_i^d(t) = C_i^d t^i (1-t)^{d-i}$ où $C_i^d = \frac{d!}{i!(d-i)!}$. Cette base de Bernstein est une base B-spline particulière en choisissant un vecteur nodal $\mathbf{t} = (t_1 = \dots = t_{k+1} = 0, t_{k+2} = \dots = t_{2k+2} = 1)$. Pour un intervalle $[a, b]$ quelconque, il faut simplement faire un changement de variable $u(t) = \frac{t-a}{b-a}$ pour revenir à la définition précédente.

(iii) Les splines engendrées par la base B-spline ont la propriété d'être locales : le fait de modifier un coefficient β_i ne modifie la spline que sur k intervalles. On pourra modifier un segment de courbe, en déplaçant un coefficient sans influencer d'autres parties de la courbe : c'est la propriété du contrôle local (Risler, 1991).

(iv) Sous l'hypothèse \mathbf{H}' et lorsqu'on se donne les k nœuds extérieurs à gauche de $\min(\mathbf{t})$ ou bien à droite de $\max(\mathbf{t})$, le polygone de contrôle détermine entièrement la spline (grâce à la bijection entre les nœuds dans le vecteur \mathbf{t} plus k nœuds extérieurs et le vecteur \mathbf{t}^*). On peut vérifier que $\#\{\mathbf{t} \cup \{k \text{ nœuds extérieurs}\}\} = \#\mathbf{t}^*$ et on a :

$$(k-1)(t_{i+1}^* - t_i^*) = t_{i+k} - t_{i+1}, \quad \text{pour tout } i. \quad (2.14)$$

2.3 La convergence vers la spline

Nous nous intéressons aux propriétés de convergence du polygone de contrôle. L'utilisation en pratique de ces propriétés est très précieuse en plusieurs études. On obtient un encadrement de la spline engendrée par la base B-spline et nous étudions le théorème de la convergence du polygone vers la spline que l'on écrira sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \sum_i B_{ik}(t)\beta_i &= \sum_i \left[\omega_{i,k}(t) B_{i,k-1}(t) + \left(1 - \omega_{i+1,k}(t)\right) B_{i+1,k-1}(t) \right] \beta_i \\ &= \sum_i B_{i,k-1}(t) \left[\left(1 - \frac{t-t_i}{t_{i+k-1}-t_i}\right) \beta_{i-1} + \left(\frac{t-t_i}{t_{i+k-1}-t_i}\right) \beta_i \right]. \end{aligned}$$

La complexité du calcul de la spline dépend avant tout du degré de différentiabilité. C'est pour cette raison qu'on s'arrête souvent à $k=4$.

Lemme 2.3.1 *Sous \mathbf{H} , on considère les B-splines B_{ik} et le vecteur nodal \mathbf{t} . Il existe une constante C_k qui dépend seulement de k telle que :*

$$\max_i \frac{|\beta_i|}{C_k} \leq \max_t \left| \sum_i B_{ik}(t)\beta_i \right| \leq \max_i |\beta_i|. \quad (2.15)$$

La valeur exacte de C_k est inconnue mais il y a une évidence numérique forte que $C_k \sim 2^{k-1}$ (de Boor, 2001). Ce résultat s'interprète comme une frontière limite imposée par le polygone de contrôle (plus précisément par les coefficients β_i) sur la spline. Donc, la courbe de la spline $s_k(t) \leq \max C_{\beta, \mathbf{t}}$.

Théorème 2.3.2 (de Boor (2001)) *Si la spline $s_k = \sum_i B_{ik}\beta_i$ est deux fois continûment différentiable, alors*

$$|\beta_{i-1} - s_k(t_i^*)| \leq C_k |\mathbf{t}|^2 \sup_t |D^2 s_k(t)|,$$

où $|\mathbf{t}| \stackrel{\text{déf}}{=} \sup_i (t_{i+1} - t_i)$.

Corollaire 2.3.3 Soit $C_{\beta, \mathbf{t}}$ le polygone de contrôle associé à la représentation $\sum_i B_{ik} \beta_i$ de la spline continue $s_k \in S_{k, \mathbf{t}}$. Alors, on a :

$$\sup_t |s_k(t) - C_{\beta, \mathbf{t}}(t)| \leq C_k |\mathbf{t}|^2 \sup_t |D^2 s_k(t)|.$$

Ainsi, le polygone $C_{\beta, \mathbf{t}}$ converge vers la spline $s_k = \sum_i B_{ik} \beta_i$ lorsque le pas entre les nœuds $|\mathbf{t}|$ devient suffisamment petit. Pour plus de détails sur les preuves de Lemme 2.3.1, théorème 2.3.2 et le corollaire 2.3.3, nous renvoyons le lecteur à consulter de Boor (2001).

2.4 Quelques propriétés de la spline

Dans la construction du polygone de contrôle, nous avons expliqué comment ce polygone est une spline d'ordre 2. Dans cette section, on se focalise sur le contrôle de la forme de la spline par le polygone de contrôle. Le lien entre la forme de la spline et son polygone de contrôle associé $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est un point essentiel dans ce chapitre. Pour étudier la préservation de la forme, nous présentons les notions de convexité, d'insertion des nœuds et de diminution de la variation.

2.4.1 L'enveloppe convexe

Chaque point de la spline est dans l'enveloppe convexe de $k + 1$ points de contrôle consécutifs : si $t \in [t_i, t_{i+1}[$ alors $s(t)$ est dans l'enveloppe convexe de $\{P_{i-k}, \dots, P_i\}$. On appelle enveloppe convexe de $\{P_{i-k}, \dots, P_i\}$ le plus petit convexe qui contient les $k + 1$ points de contrôle consécutifs P_{i-k}, \dots, P_i . Pour une spline d'ordre 2, on obtient les enveloppes convexes en construisant tous les triangles à sommets P_i, P_{i+1} et P_{i+2} ; en ordre 3 on utiliserait des quadrilatères, et ainsi de suite. C'est la propriété de l'enveloppe convexe (Risler, 1991).

Prenons à titre d'exemple une spline s_3 d'ordre 3. Cette spline s_3 est de classe C^1 , sa courbe est quadratique par morceaux et passe entre les sommets P_i (cf. Figure 2.6). La spline est à l'intérieur des enveloppes convexes (quadrilatères convexes dans ce cas) où chaque enveloppe est obtenu à partir de 4 points de contrôle consécutifs.

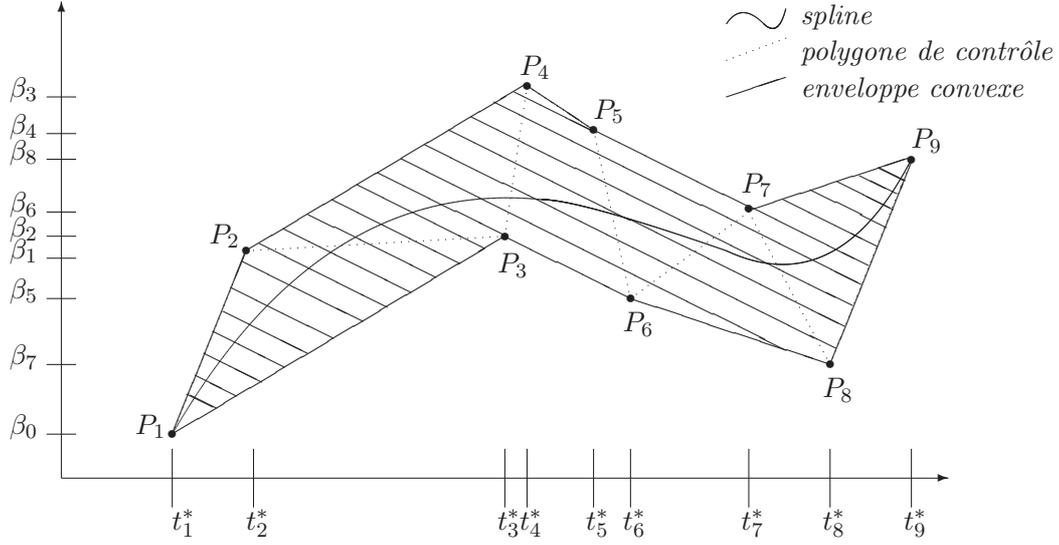


Figure 2.6 – Le polygone de contrôle et sa spline d'ordre 3 associée : avec les 8 points de contrôle, nous obtenons 6 enveloppes convexes contenant tous les points de la spline ($\{P_1, \dots, P_4\}, \{P_2, \dots, P_5\}, \{P_3, \dots, P_6\}, \{P_4, \dots, P_7\}, \{P_5, \dots, P_8\}$ et $\{P_6, \dots, P_9\}$).

2.4.2 Insertion des nœuds

La proposition 2.4.1 ci-dessous permet d'ajouter un nouveau nœud \bar{t} et calculer un nouveau polygone de contrôle sans changer la spline.

Proposition 2.4.1 *Sous \mathbf{H} , soient $C_{\beta, \mathbf{t}}$ un polygone de contrôle et $s_k(t)$ sa spline associée. On considère \bar{t} un nœud supplémentaire et on pose :*

$$\bar{\beta}_i = \begin{cases} \beta_i & \text{si } t_{i+k-1} \leq \bar{t}; \\ \omega_{i,k}(\bar{t})\beta_i + (1 - \omega_{i,k}(\bar{t}))\beta_{i-1} & \text{si } t_i < \bar{t} < t_{i+k-1}; \\ \beta_{i-1} & \text{si } \bar{t} \leq t_i, \end{cases}$$

où $\omega_{i,k}$ est définie par (2.3) et on définit $\bar{\beta} \stackrel{\text{déf}}{=} (\bar{\beta}_i)$ les coefficients pour la spline \bar{s}_k d'ordre k associée au vecteur de nœuds $\bar{\mathbf{t}} = \mathbf{t} \cup \bar{t}$ et au polygone de contrôle $\bar{C}_{\bar{\beta}, \bar{\mathbf{t}}}$. Alors, pour tout $t \in \mathbb{R}$, on a :

$$\bar{s}_k(t) = s_k(t) \quad \text{et} \quad \bar{C}_{\bar{\beta}, \bar{\mathbf{t}}}(\bar{t}_i^*) = C_{\beta, \mathbf{t}}(\bar{t}_i^*), \quad \text{pour tout } i,$$

où $\bar{t}_i^* \stackrel{\text{déf}}{=} (\bar{t}_{i+1} + \dots + \bar{t}_{i+k-1}) / (k-1)$.

On obtient le même polygone aux points \bar{t}_i^* et la même spline pour tout t après l'insertion d'un nœud. Chaque nœud inséré représente un point de contrôle supplémentaire. La

proposition 2.4.1 se démontre par récurrence (Risler, 1991).

2.4.3 La variation de la spline

Le cadre général de l'estimation sous contraintes de forme exige la considération seulement des fonctions de régression f dont la variation est connue au préalable. Évidemment, on peut déduire la variation de f si on dispose de la variation de sa dérivée ou de son intégrale. La connaissance a priori de la variation de f permet de spécifier les contraintes adéquates à imposer sur la forme de l'estimateur. Dans ce paragraphe, on propose, d'une manière précise, de dériver la spline s_k et étudier quelques variations.

Théorème 2.4.2 (de Boor, 2001) *Sous \mathbf{H} , si τ , défini dans (2.10) avec la fonction λ_{ik} , est choisi dans le support $[t_i, t_{i+k}[$ de la fonction B-spline B_{ik} , alors*

$$\lambda_{ik} \left(\sum_j B_{jk} \beta_j \right) = \beta_i.$$

Pour démontrer le théorème 2.4.2, il faut prouver sous certaines conditions qu'on a

$$\lambda_{ik} B_{jk} = \delta_{ij} \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{cases} 1, & \text{si } i = j; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Pour plus de détails sur cette preuve, on pourra consulter de Boor (2001, p.17).

Propriété (de Boor, 2001) En choisissant $\tau \in]t_i, t_{i+k-1}[=]t_{i-1}, t_{i+k-1}[\cap]t_i, t_{i+k}[$, la dérivée première de la spline $s_k = \sum_i \beta_i B_{ik}$ est également une spline de même vecteur nodal (t_i) mais d'ordre inférieur qui vaut $k - 1$ et on a :

$$D \sum_i \beta_i B_{ik} = \sum_i \beta_i^{[1]} B_{i,k-1}. \quad (2.16)$$

Nous remarquons que la spline $s_k = \sum_i \beta_i B_{ik}$ peut ne pas être même continue en t_i et à ce moment $(Ds_k)(t_i)$ n'a pas de sens. Par contre la limite à droite $Ds_k(t_i+)$ et la limite à gauche $(Ds_k)(t_i-)$ ont toujours un sens. On peut obtenir les coefficients de la dérivée première de la spline par :

$$\beta_i^{[1]} = \lambda_{i,k-1}(Ds_k). \quad (2.17)$$

Dans la suite, nous utilisons (2.16) et (2.17) pour calculer les dérivées successives de la spline s_k et plus précisément pour exprimer les coefficients des splines dérivées en fonction des coefficients $\lambda_{i,k}$ définis par (2.10).

Lemme 2.4.3 *Soit \mathbf{t} le vecteur nodal tel que les nœuds t_i sont équidistants : pour tout i , $(t_{i+1} - t_i)$ est une constante strictement positive. On note :*

$$\mathbf{P}_1 : \forall i, \forall k > 1, (t_{i+k-1} - t_i)\psi_{i,k-1} = \psi_{ik}^{[1]};$$

et pour tout $\mathbf{n} > 1$, $\mathbf{P}_n : \forall i, \forall k > \mathbf{n}, (t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-n} - t_i)\psi_{i,k-n} = \psi_{ik}^{[n]}$,

où, $C_i^n = \mathbf{n}!/i!(\mathbf{n} - i)!$, et

$$\begin{aligned} \psi_{ik}^{[n]} = & \left(C_0^n \psi_{ik} - C_1^n \psi_{i-1,k} + C_2^n \psi_{i-2,k} - C_3^n \psi_{i-3,k} \right. \\ & \left. + \underbrace{\cdots}_{(\mathbf{n}-5) \text{ termes}} + (-1)^{\mathbf{n}-1} C_{\mathbf{n}-1}^n \psi_{i-\mathbf{n}+1,k} + (-1)^{\mathbf{n}} C_{\mathbf{n}}^n \psi_{i-\mathbf{n},k} \right). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Preuve Le lemme 2.4.3 se démontre par récurrence. Premièrement, vérifions le lemme pour $\mathbf{n} = 1$. En remplaçant la fonction $\psi_{ik}^{[1]}$ par son expression explicite donnée par (2.18), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \psi_{ik}^{[1]} &= \left(C_0^1 \psi_{ik} + (-1)^1 C_1^1 \psi_{i-1,k} \right) = \psi_{ik} - \psi_{i-1,k} \\ &= (t_{i+1} - \tau) \cdots (t_{i+k-1} - \tau) - (t_i - \tau) \cdots (t_{i+k-2} - \tau) \\ &= (t_{i+1} - \tau) \cdots (t_{i+k-2} - \tau) [t_{i+k-1} - \tau - (t_i - \tau)] \\ &= \psi_{i,k-1} (t_{i+k-1} - t_i). \end{aligned} \quad (2.19)$$

En appliquant le lemme 2.4.3 pour $\mathbf{n} = 1$, on obtient le même résultat que (2.19). Ainsi, la proposition est vérifiée pour $\mathbf{n} = 1$. Deuxièmement, supposons $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n$ vraies et montrons que \mathbf{P}_{n+1} est vraie. Soit $i, k > \mathbf{n} + 1$. En effectuant le changement de variable $k' = k + 1$ dans la proposition du lemme 2.4.3, nous obtenons :

$$\begin{aligned} (t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-n} - t_i)\psi_{i,k-n} &= (t_{i+k'-2} - t_i) \cdots (t_{i+k'-n-1} - t_i)\psi_{i,k'-n-1} \\ &= \psi_{i,k}^{[n]} = \psi_{i,k'-1}^{[n]}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

En utilisant l'égalité $(t_{i+k-2} - t_i) \cdots (t_{i+k-n-1} - t_i)\psi_{i,k-n-1} = \psi_{i,k-1}^{[n]}$ et le fait que $C_i^n +$

$C_{i+1}^n = C_{i+1}^{n+1}$, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
\psi_{i,k-1}^{[n]} &= (t_{i+k-2} - t_i) \cdots (t_{i+k-(n+1)} - t_i) \psi_{i,k-(n+1)} = \left(C_0^n \psi_{i,k-1} - C_1^n \psi_{i-1,k-1} + C_2^n \psi_{i-2,k-1} \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\cdots}_{(n-4) \text{ termes}} + (-1)^{n-1} C_{n-1}^n \psi_{i-n+1,k-1} + (-1)^n C_n^n \psi_{i-n,k-1} \right) \\
&= \left(C_0^n \left[\frac{\psi_{i,k} - \psi_{i-1,k}}{(t_{i+k-1} - t_i)} \right] - C_1^n \left[\frac{\psi_{i-1,k} - \psi_{i-2,k}}{(t_{i+k-2} - t_{i-1})} \right] + C_2^n \left[\frac{\psi_{i-2,k} - \psi_{i-3,k}}{(t_{i+k-3} - t_{i-2})} \right] \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\cdots}_{(n-4) \text{ termes}} + (-1)^{n-1} C_{n-1}^n \left[\frac{\psi_{i-n+1,k} - \psi_{i-n,k}}{(t_{i+k-n} - t_{i-n+1})} \right] + (-1)^n C_n^n \left[\frac{\psi_{i-n,k} - \psi_{i-n-1,k}}{(t_{i+k-n-1} - t_{i-n})} \right] \right) \\
&= \frac{1}{(t_{i+k-1} - t_i)} \left(C_0^n \psi_{i,k} - [C_0^n + C_1^n] \psi_{i-1,k} + [C_1^n + C_2^n] \psi_{i-2,k} - [C_2^n + C_3^n] \psi_{i-3,k} \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\cdots}_{(n-4) \text{ termes}} + (-1)^n [C_{n-1}^n + C_n^n] \psi_{i-n,k} + (-1)^{n+1} C_n^n \psi_{i-(n+1),k} \right) \\
&= \frac{1}{(t_{i+k-1} - t_i)} \left(C_0^{n+1} \psi_{i,k} - C_1^{n+1} \psi_{i-1,k} + C_2^{n+1} \psi_{i-2,k} - C_3^{n+1} \psi_{i-3,k} \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\cdots}_{(n-5) \text{ termes}} + (-1)^{n-1} C_{n-1}^{n+1} \psi_{i-n+1,k} + (-1)^n C_n^{n+1} \psi_{i-n,k} + (-1)^{n+1} C_{n+1}^{n+1} \psi_{i-(n+1),k} \right).
\end{aligned}$$

Alors, nous obtenons finalement l'égalité pour un entier $n + 1$:

$$\begin{aligned}
(t_{i+k-1} - t_i)(t_{i+k-2} - t_i) \cdots (t_{i+k-(n+1)} - t_i) \psi_{i,k-(n+1)} &= \left(C_0^{n+1} \psi_{i,k} - C_1^{n+1} \psi_{i-1,k} + C_2^{n+1} \psi_{i-2,k} \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{\cdots}_{(n-5) \text{ termes}} + (-1)^{n-1} C_{n-1}^{n+1} \psi_{i-n+1,k} + (-1)^n C_n^{n+1} \psi_{i-n,k} + (-1)^{n+1} C_{n+1}^{n+1} \psi_{i-(n+1),k} \right) \\
&= \sum_{\kappa=0}^{n+1} (-1)^\kappa C_\kappa^{n+1} \psi_{i-\kappa,k}. \tag{2.21}
\end{aligned}$$

D'où P_{n+1} . □

Proposition 2.4.4 *Sous \mathbf{H} , soit \mathbf{t} le vecteur nodal tel que les nœuds t_i sont équidistants : $(t_{i+1} - t_i)$ est une constante strictement positive pour tout i . Pour tout $k > (\mathbf{n} + 1)$ et $\tau \in]t_i, t_{i+k-\mathbf{n}}[$, la dérivée $\mathbf{n}^{\text{ème}}$ de la spline $s_k = \sum_i B_{ik}\beta_i$ est la spline d'ordre $(k - \mathbf{n})$ donnée par :*

$$D^{\mathbf{n}}s_k = \begin{cases} (k-1) \sum_i \frac{\beta_i^{[\mathbf{n}]}}{(t_{i+k-1}-t_i)} B_{i,k-1}, & \text{si } \mathbf{n} = 1; \\ (k-1) \cdots (k-\mathbf{n}) \sum_i \frac{\beta_i^{[\mathbf{n}]}}{(t_{i+k-1}-t_i) \cdots (t_{i+k-\mathbf{n}}-t_i)} B_{i,k-\mathbf{n}}, & \text{si } \mathbf{n} > 1, \end{cases}$$

où

$$\beta_i^{[\mathbf{n}]} = \left(C_0^{\mathbf{n}}\beta_i - C_1^{\mathbf{n}}\beta_{i-1} + C_2^{\mathbf{n}}\beta_{i-2} - C_3^{\mathbf{n}}\beta_{i-3} + \underbrace{\cdots}_{(\mathbf{n}-7) \text{ termes}} + (-1)^{\mathbf{n}-3} C_{\mathbf{n}-3}^{\mathbf{n}}\beta_{i-\mathbf{n}+3} \right. \\ \left. + (-1)^{\mathbf{n}-2} C_{\mathbf{n}-2}^{\mathbf{n}}\beta_{i-\mathbf{n}+2} + (-1)^{\mathbf{n}-1} C_{\mathbf{n}-1}^{\mathbf{n}}\beta_{i-\mathbf{n}+1} + (-1)^{\mathbf{n}} C_{\mathbf{n}}^{\mathbf{n}}\beta_{i-\mathbf{n}} \right).$$

Preuve La proposition 2.4.4 se démontre par récurrence. La dérivée première de la spline s_k s'obtient directement à partir du résultat de de Boor (2001, page. 22) :

$$Ds_k = (k-1) \sum_i \frac{(\beta_i - \beta_{i-1})}{(t_{i+k-1} - t_i)} B_{i,k-1}, \quad \text{si } t_i < t_{i+k-1}.$$

En appliquant la proposition 2.4.4 pour $\mathbf{n} = 1$ et en remarquant que $\beta_i^{[1]} = \beta_i - \beta_{i-1}$, on obtient le même résultat que de Boor pour la dérivée première. Ainsi, la proposition est vérifiée pour $\mathbf{n} = 1$. Supposons la proposition satisfaite par un entier \mathbf{n} . Vérifions maintenant la proposition pour un entier $\mathbf{n}+1$. Pour l'obtention de la dérivée $(\mathbf{n}+1)^{\text{ème}}$ de s_k , il faut exprimer la fonction $\lambda_{i,k-(\mathbf{n}+1)}D$ comme une combinaison linéaire des fonctions λ_{ik} . On rappelle que la fonction λ_{ik} dépend linéairement de ψ_{ik} et est définie par :

$$\lambda_{ik} : g \mapsto \sum_{\mu=1}^k \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} g(\tau), \quad (2.22)$$

et, d'après le lemme 2.4.3, on peut exprimer $\psi_{i,k-(\mathbf{n}+1)}$, lorsque $(t_{i+1} - t_i)$ est une constante strictement positive, en fonction de $\psi_{i,k}$ de la manière suivante :

$$(t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-(\mathbf{n}+1)} - t_i) \psi_{i,k-(\mathbf{n}+1)} = \psi_{ik}^{[\mathbf{n}+1]}, \quad (2.23)$$

où $\psi_{ik}^{[n+1]}$ est donnée par (2.21). Nous posons $\lambda_{ik}^{[n+1]}$ comme une combinaison linéaire des fonctions λ_{ik} de la façon suivante :

$$\lambda_{ik}^{[n+1]} = \left(C_0^{n+1} \lambda_{ik} - C_1^{n+1} \lambda_{i-1,k} + C_2^{n+1} \lambda_{i-2,k} - C_3^{n+1} \lambda_{i-3,k} + \underbrace{\quad \quad \quad}_{(n-6) \text{ termes}} + (-1)^{n-2} C_{n-2}^{n+1} \lambda_{i-n+2,k} + (-1)^{n-1} C_{n-1}^{n+1} \lambda_{i-n+1,k} + (-1)^n C_n^{n+1} \lambda_{i-n,k} + (-1)^{n+1} C_{n+1}^{n+1} \lambda_{i-(n+1),k} \right).$$

Notre but se résume à exprimer $D^{n+1}s_k$ en fonction de $\lambda_{ik}^{[n+1]}$. D'ailleurs, toutes ces considérations impliquent que :

$$\begin{aligned} \lambda_{ik}^{[n+1]} g(\tau) &= \sum_{\mu=1}^k \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{ik}^{[n+1]}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} g(\tau) \\ &= (t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-(n+1)} - t_i) \sum_{\mu=1}^{k-(n+1)} \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{i,k-(n+1)}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} g(\tau), \end{aligned} \quad (2.24)$$

en combinant les deux égalités (2.22), (2.23) et sachant que $D^{k-(n+1)}\psi_{i,k-(n+1)} = 0$. D'après la définition de $\lambda_{i,k}$ dans l'égalité (2.22), on peut établir que :

$$\begin{aligned} \lambda_{i,k-(n+1)} D^{n+1} g(\tau) &= \sum_{\mu=1}^{k-(n+1)} \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{i,k-(n+1)}(\tau)}{(k-n-2)!} D^{k-(n+1)-\mu} D^{n+1} g(\tau) \\ &= (k-1) \cdots (k-n-1) \sum_{\mu=1}^{k-(n+1)} \frac{(-D)^{\mu-1} \psi_{i,k-(n+1)}(\tau)}{(k-1)!} D^{k-\mu} g(\tau). \end{aligned}$$

En utilisant l'égalité (2.24), la fonction $\lambda_{i,k-(n+1)}$ s'exprime autrement sous la forme d'une combinaison linéaire des fonctions λ_{ik} de la manière suivante :

$$\lambda_{i,k-(n+1)} D^{n+1} = \frac{(k-1) \cdots (k-n-1)}{(t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-(n+1)} - t_i)} \lambda_{ik}^{[n+1]}. \quad (2.25)$$

D'après le théorème 2.4.2, nous pouvons exprimer les coefficients β_i de la spline par $\beta_i = \lambda_{i,k}(s_k)$. En choisissant $\tau \in]t_i, t_{i+k-n-1}[$ et moyennant (2.17), on a

$$\begin{aligned} D^{n+1}s_k &= \sum_i \lambda_{i,k-(n+1)}(D^{n+1}s_k) B_{i,k-(n+1)} \\ &= \sum_i \frac{(k-1) \cdots (k-n-1)}{(t_{i+k-1} - t_i) \cdots (t_{i+k-(n+1)} - t_i)} \lambda_{ik}^{[n+1]}(s_k) B_{i,k-(n+1)}. \end{aligned}$$

On suppose que $B_{i,k-(n+1)} \neq 0$, i.e. $t_i < t_{i+k-n-1}$, avec $\tau \in]t_i, t_{i+k-n-1}[=]t_{i-1}, t_{i+k-n-1}[\cap]t_i, t_{i+k-n}[$. Alors, nous obtenons l'égalité pour l'entier $n + 1$:

$$D^{n+1}s_k(t) = (k-1) \cdots (k-n-1) \sum_i \frac{\beta_i^{[n+1]}}{(t_{i+k-1}-t_i) \cdots (t_{i+k-n-1}-t_i)} B_{i,k-n-1},$$

où

$$\begin{aligned} \beta_i^{[n+1]} = & \left(C_0^{n+1}\beta_i - C_1^{n+1}\beta_{i-1} + C_2^{n+1}\beta_{i-2} - C_3^{n+1}\beta_{i-3} + \underbrace{\cdots}_{(n-6) \text{ termes}} + (-1)^{n-2} C_{n-2}^{n+1}\beta_{i-n+2} \right. \\ & \left. + (-1)^{n-1} C_{n-1}^{n+1}\beta_{i-n+1} + (-1)^n C_n^{n+1}\beta_{i-n} + (-1)^{n+1} C_{n+1}^{n+1}\beta_{i-(n+1)} \right). \end{aligned}$$

La proposition 2.4.4 est vérifiée également pour $n + 1$. \square

Soit f une fonction inconnue à valeurs réelles définie sur $[a, b] \subset \mathbb{R}$ qu'on cherche à estimer. Parmi les fonctions de régression les plus modélisées en pratique, figure le cas de fonction croissante, fonction décroissante et fonction unimodale ou plurimodale.

Nous considérons la séquence finie des coefficients β_i où $i = 1, \dots, m_k$ et on s'intéresse à exprimer explicitement quelques contraintes de forme pour la spline d'ordre k $s_k(t) = \sum_{i=1}^{m_k} B_{ik}(t)\beta_i$ (Chang et al., 2007).

Proposition 2.4.5 *Sous les hypothèses (H') et l'équidistance des nœuds ($(t_{i+1} - t_i)$ est une constante strictement positive).*

- (i) (s_k est monotone) Si $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \cdots \leq \beta_{m_k}$, alors pour $t \in [a, b]$ et $k \geq 2$ on a $Ds_k(t) \geq 0$.
- (ii) (s_k est Unimodale Concave) Soit $m_k \geq 3$. Si $\beta_2 - \beta_1 > 0$, $\beta_{m_k} - \beta_{m_k-1} < 0$, $(\beta_i + \beta_{i-2}) \leq 2\beta_{i-1}$ pour $i = 3, \dots, m_k - 1$, alors $Ds_k(a) > 0$, $Ds_k(b) < 0$, et $D^2s_k(t) \leq 0$ pour $t \in [a, b]$ et $k \geq 3$.

Preuve D'après la proposition 2.4.4, la dérivée $Ds_k(t) = (k-1) \sum_i \frac{\beta_i - \beta_{i-1}}{(t_{i+k-1} - t_i)} B_{i,k-1}(t)$ et la dérivée seconde $D^2s_k(t) = (k-1)(k-2) \sum_i \frac{\beta_i - 2\beta_{i-1} + \beta_{i-2}}{(t_{i+k-2} - t_i)(t_{i+k-1} - t_i)} B_{i,k-2}(t)$, alors la démonstration de (i) et (ii) est immédiate. \square

Dans la proposition 2.4.5, on note que (ii) représente une condition suffisante pour que la spline s_k soit unimodale concave. Nous redémontrons, un peu plus tard, les résultats (i) et (ii) grâce au polygone de contrôle sans contrainte (d'équidistance) sur les nœuds.

2.4.4 Diminution de la variation

Soit $\vartheta(\cdot)$ une notation qui désigne le nombre des changements de signe dans une séquence de réels. Pour $0 \leq i \leq p$, on pose $\mathfrak{s}_i = \text{sgn}(a_i)$ où $\text{sgn}(x) = -1$ ou 1 selon que x est strictement négatif ou strictement positif si $a_i \neq 0$ et $\mathfrak{s}_i = \text{sgn}(a_{i-1})$ si $a_i = 0$. Lorsque $a_0 = 0$, alors \mathfrak{s}_0 sera égale au signe du premier voisin de a_0 non nul. On dit qu'il y a un changement de signe dans la suite a_0, a_1, \dots, a_p s'il existe i et j tels que :

$$\mathfrak{s}_i \cdot \mathfrak{s}_{i+j} < 0 \quad \text{et} \quad \mathfrak{s}_i = \dots = \mathfrak{s}_{i+j-1}.$$

Par exemple, le nombre de changements de signe dans les séquences suivantes est :

$$\vartheta(1, 2, -1, -3) = 1, \quad \vartheta(1, -1, 0, 3, -1) = 3, \quad \vartheta(0, 0, 1) = 0.$$

On définit le nombre des changements de signe du polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ par le nombre des changements de signe des coefficients β . On note ce nombre par $\vartheta(C_{\beta, \mathbf{t}}(\mathbf{t}^*)) = \vartheta(\beta)$. La variation d'une fonction à valeurs réelles $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ est le nombre sup $\vartheta(f(\tau_1), \dots, f(\tau_\ell))$ pour toute les suites de points $(\tau_1, \dots, \tau_\ell)$ de $[a, b]$ tels que $(\tau_1 < \dots < \tau_\ell)$. Cette variation sera notée $\vartheta(f)$.

Nous énonçons par la suite un résultat important sur la variation de la spline. Dans ce résultat, on considère une séquence finie de nœuds et on pose $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_{m_k})'$.

Théorème 2.4.6 (Diminution de la variation) *Sous \mathbf{H}' , soit $s_k = \sum_{i=1}^{m_k} B_{ik} \beta_i$ la spline définie sur $[a, b]$ tel que $t_k \leq a < b \leq t_{m_k-k}$ et associée au polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$. Alors, on a : $\vartheta(s_k) \leq \vartheta(\beta)$.*

Dans le théorème 2.4.6, la spline s_k est définie sur $[a, b]$ tels que $a \geq t_k$ et $b \leq t_{m_k-k}$. Les deux conditions sur les nœuds t_k et t_{m_k-k} sont imposées pour assurer que $t_1^* \leq a$ et $t_{m_k}^* \geq b$ ce qui permet de comparer les variations de la spline et du polygone de contrôle. Avec le choix de $a \geq t_k$ et $b \leq t_{m_k-k}$, les deux courbes de la spline s_k et de son polygone de contrôle ne sont pas décalés sur l'intervalle $[a, b]$. La démonstration du théorème 2.4.6 s'organise autour de l'idée suivante : après l'insertion d'un nœud, le polygone $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est remplacé par le polygone $\overline{C}_{\overline{\beta}, \overline{\mathbf{t}}}$ tel que $\vartheta(\overline{C}_{\overline{\beta}, \overline{\mathbf{t}}}) \leq \vartheta(C_{\beta, \mathbf{t}})$. Pour plus de détails sur la preuve, on pourra se rapporter à de Boor (2001, page. 32).

Lorsqu'on considère $t_1 = \dots = t_{k+1} < t_{k+2}$, on obtient un nœud de multiplicité $k+1$ à l'extrémité gauche. La spline s_k passe ainsi par le premier point de contrôle P_1 et est tangente au premier segment du polygone de contrôle : c'est la condition de raccord à gauche de la spline et le polygone. Cela n'est valable qu'aux nœuds de multiplicité $k+1$.

2.5 Contrôle de la forme par le polygone de contrôle

Les propriétés de la spline ainsi présentées permettent d'étudier le lien entre la forme de la spline et son polygone de contrôle. Pour adopter un cadre de régression sous contraintes permettant de prendre en compte des contraintes de régularité et de forme, nous contrôlons la régularité par l'ordre k et le véritable problème consiste ainsi à contrôler la forme de la spline. Nous montrons que la forme d'une spline engendrée par une base de B-spline B_{ik} peut être contrôlée grâce au polygone de contrôle. La proposition 2.5.3 montre qu'il est possible de contrôler la forme d'une spline par l'intermédiaire de son polygone de contrôle.

Dans la suite, on se sert du concept de la diminution de variation pour expliquer la propriété de la préservation de forme des B-splines. D'après cette propriété, la spline et son polygone de contrôle ont la même forme.

Corollaire 2.5.1 (Préservation de la forme) *Une ligne droite traverse au maximum la spline engendrée par la base B-spline B_{ik} le nombre de fois qu'elle traverse son polygone de contrôle $C_{\beta,t}$.*

La formulation mathématique de la préservation de forme est illustrée par la figure 2.7. Pour plus de détails sur la preuve du corollaire 2.5.1, on pourra consulter de Boor (2001).

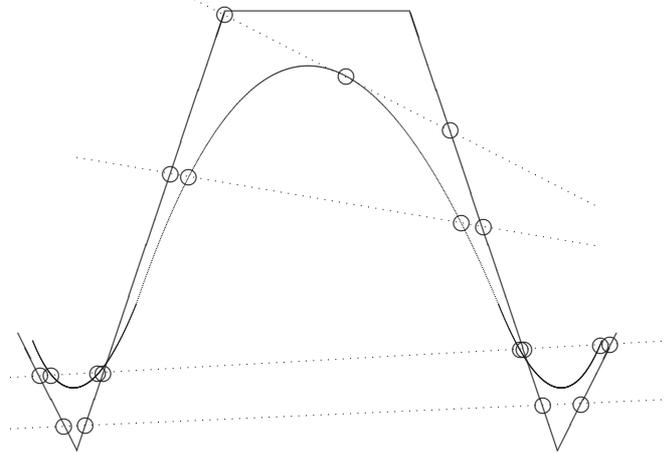


Figure 2.7 – Une spline cubique, son polygone de contrôle et différentes droites qui les coupent en des points.

Ainsi le paramètre principal est le polygone de contrôle, dont la spline considérée épouse les formes. Le paramètre secondaire est le vecteur des nœuds. On s'en sert pour s'assurer

que la spline passe par des points prescrits avec des tangentes prescrites pour contrôler la forme.

Définition 2.5.2 (i) Une fonction f continue est κ -monotone sur $[a, b]$ s'il existe exactement $\kappa - 1$ réels distincts $x'_1, \dots, x'_{\kappa-1} \in]a, b[$ tels que f est croissante (resp. décroissante) sur $[a, x'_1]$ et $[x'_{j'}, x'_{j'+1}]$ où $j' = 2, 4, \dots$ et décroissante (resp. croissante) sur $[x'_{j''}, x'_{j''+1}]$ où $j'' = 1, 3, \dots$

(ii) Une fonction f est dite **unimodale** s'il existe $x^* \in]a, b[$ tel que f est croissante sur $[a, x^*]$ et décroissante sur $[x^*, b]$.

(iii) Une fonction f continue est κ -convexe sur $[a, b]$ s'il existe exactement $\kappa - 1$ réels distincts $x'_1, \dots, x'_{\kappa-1} \in]a, b[$ tels que f est convexe (resp. concave) sur $[a, x'_1]$ et $[x'_{j'}, x'_{j'+1}]$ où $j' = 2, 4, \dots$ et concave (resp. convexe) sur $[x'_{j''}, x'_{j''+1}]$ où $j'' = 1, 3, \dots$

Proposition 2.5.3 Sous l'hypothèse **H'**,

(i) (Préservation de la monotonie) Si le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est monotone alors la spline associée s_k est également monotone.

(ii) (Préservation de la convexité) Si le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est convexe, alors la spline associée s_k est également convexe.

(iii) (Préservation de la κ -monotonie) Si le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est κ -monotone alors la spline associée s_k est κ' -monotone avec $\kappa' \leq \kappa$.

(iv) (Préservation de l'unimodalité) En particulier, si le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$ est unimodal alors la spline associée s_k est unimodale ou monotone.

Preuve La démonstration de (i) et (ii) est détaillée dans de Boor (2001, p.32). Pour la démonstration de (iii) (la κ -monotonie), soient $C_{\beta, \mathbf{t}}$ un polygone de contrôle κ -monotone et s_k sa spline associée. Supposons, sans perte de généralité, que le polygone de contrôle est croissant au voisinage de a en considérant les coefficients $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{l_1} \geq \beta_{l_1+1} \geq \dots \geq \beta_{l_2} \leq \dots \leq \beta_{l_3} \geq \beta_{l_3+1} \dots \beta_{l_{\kappa-1}-1} \leq \beta_{l_{\kappa-1}} \geq \beta_{l_{\kappa-1}+1} \geq \dots \geq \beta_{m_k}$ et on veut montrer que s_k est au plus κ -monotone. Nous raisonnons par absurde et nous supposons également que la spline s_k est κ'' -monotone, où $\kappa'' > \kappa$. Alors, il existe les intervalles $I_1 =]a_1, b_1[, I_2 =]a_2, b_2[, \dots, I_\kappa =]a_\kappa, b_\kappa[, I_{\kappa+1} =]a_{\kappa+1}, b_{\kappa+1}[, \dots, I_{\kappa''} =]a_{\kappa''}, b_{\kappa''}[$ avec $a_1 < b_1 < a_2 < b_2 < \dots < a_{\kappa''} < b_{\kappa''}$ tels que $s_k(a_1) < s_k(b_1), s_k(a_2) > s_k(b_2), \dots, s_k(a_\kappa) < s_k(b_\kappa), s_k(a_{\kappa+1}) > s_k(b_{\kappa+1}), \dots, s_k(a_{\kappa''}) < s_k(b_{\kappa''})$. D'après la proposition 2.4.1,

il est possible d'insérer K nœuds sans modifier la spline s_k . Notons $C_{\beta, \mathbf{t}}^K$ le polygone de contrôle avec les K nœuds insérés. L'idée est de rajouter K nœuds de sorte que le pas entre les nœuds $|\mathbf{t}| \stackrel{\text{d\u00e9f}}{=} \sup_i (t_{i+1} - t_i) \rightarrow 0$. Ainsi, d'après le corollaire 2.3.3, le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}^K$ converge vers la spline s_k et on a

$$\sup_{t \in [a, b]} |s_k(t) - C_{\beta, \mathbf{t}}^K(t)| \leq C_k |\mathbf{t}|^2 \sup_{t \in [a, b]} |D^2 s_k(t)|.$$

On en d\u00e9duit que $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_1) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_1)$, $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_2) > C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_2)$, \dots , $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_\kappa) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_\kappa)$, $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_{\kappa+1}) > C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_{\kappa+1})$, \dots , $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_{\kappa''}) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_{\kappa''})$. Or, d'apr\u00e8s la proposition 2.4.1, le coefficient $\bar{\beta}_i$ \u00e0 ins\u00e9rer suite \u00e0 l'insertion d'un n\u00e9ud \bar{t} v\u00e9rifie toujours une combinaison convexe de β_i et β_{i-1} donn\u00e9e par :

$$\bar{\beta}_i = \begin{cases} \beta_i & \text{si } t_{i+k-1} \leq \bar{t}; \\ \omega_{i,k}(\bar{t})\beta_i + (1 - \omega_{i,k}(\bar{t}))\beta_{i-1} & \text{si } t_i < \bar{t} < t_{i+k-1}; \\ \beta_{i-1} & \text{si } \bar{t} \leq t_i, \end{cases}$$

ce qui implique que l'insertion de $\bar{\beta}_i$ n'entra\u00eene pas la modification de l'ordre des coefficients. Ainsi, un polygone de contr\u00f4le κ -monotone demeure κ -monotone apr\u00e8s l'insertion d'un ou des plusieurs n\u00e9uds ce qui fait que les in\u00e9galit\u00e9s $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_1) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_1)$, $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_2) > C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_2)$, \dots , $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_\kappa) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_\kappa)$, $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_{\kappa+1}) > C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_{\kappa+1})$, \dots , $C_{\beta, \mathbf{t}}^K(a_{\kappa''}) < C_{\beta, \mathbf{t}}^K(b_{\kappa''})$ deviennent impossibles (en contradiction avec l'hypoth\u00e8se $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{l_1} \geq \beta_{l_1+1} \geq \dots \geq \beta_{l_2} \leq \dots \leq \beta_{l_3} \geq \beta_{l_3+1} \dots \beta_{l_{\kappa-1}-1} \leq \beta_{l_{\kappa-1}} \geq \beta_{l_{\kappa-1}+1} \geq \dots \geq \beta_{m_\kappa}$). Donc, la spline s_k ne peut pas \u00eatre κ'' -monotone, o\u00f9 $\kappa'' > \kappa$, mais elle est κ' -monotone avec $\kappa' \leq \kappa$.

Pour la d\u00e9monstration de (iv) (pr\u00e9servation de l'unimodalit\u00e9), on remarque, d'apr\u00e8s la d\u00e9finition 2.5.2, qu'une fonction continue est unimodale si elle est 2-monotone. Alors, le r\u00e9sultat (iv) s'obtient imm\u00e9diatement en utilisant la d\u00e9monstration (iii) de la proposition 2.5.3 pour $\kappa = 2$. \square

Remarques (i) La conservation de la monotonie et la convexit\u00e9 proviennent du fait que toute droite coupe le polygone plus de fois que sa spline associ\u00e9e d'apr\u00e8s le corollaire 2.5.1. En effet, soient $C_{\beta, \mathbf{t}}$ un polygone de contr\u00f4le, s_k sa spline associ\u00e9e et \mathbf{p} une droite. La variation $\vartheta(s_k - \mathbf{p})$ est le nombre d'intersection entre la spline et la droite \mathbf{p} . \u00c9tant donn\u00e9e que le polygone de contr\u00f4le de \mathbf{p} est la droite \mathbf{p} elle-m\u00eame, alors $C_{\beta, \mathbf{t}} - \mathbf{p}$ est le polygone de contr\u00f4le de la spline $s_k - \mathbf{p}$. D'apr\u00e8s le th\u00e9or\u00e8me 2.4.6, on a la majoration :

$$\vartheta(s_k - \mathbf{p}) \leq \vartheta(C_{\beta, \mathbf{t}} - \mathbf{p}),$$



Figure 2.8 – Un exemple de polygone de contrôle κ -monotone ($\kappa = 12$) où aucune droite ne le coupe en 12 points.

où $\vartheta(C_{\beta,t} - \mathbf{p})$ est le nombre d'intersection entre le polygone de contrôle $C_{\beta,t}$ et la droite \mathbf{p} .

(ii) La difficulté de démontrer la préservation de la κ -monotonie dans la proposition 2.5.3(iii) moyennant la remarque (i) seulement, réside dans la difficulté, d'une part, de prouver la préservation locale de la monotonie pour chaque morceau du polygone et, d'autre part, de caractériser un polygone κ -monotone uniquement en considérant ses intersections avec des droites horizontales ou des lignes droites (c.f. Figure 2.8).

(iii) Pour une courbe polygonale $P_1P_2 \cdots P_{m_k}$ obtenue à partir des points $P_i = (t_i^*, \beta_{i-1}) \in \mathbb{R}^2$, $i = 1, \dots, m_k$, et sous la condition $P_{i-1} \neq P_i$, $i = 2, \dots, m_k$, le nombre de points d'inflexion est égale à $\vartheta(V_3, \dots, V_{m_k})$ sachant que $V_i = (\beta_{i-1} - \beta_{i-2}) \times (\beta_i - \beta_{i-1})$ où $i = 3, \dots, m_k$ (Gautam, 2007).

Le polygone de contrôle a été défini comme une fonction linéaire qui interpôle les points de contrôle. Cet outil qu'on construit à partir du vecteur des nœuds et les coefficients β est d'une importance extrême dans le contrôle des variations de la spline. Comme on vient de voir dans le résultat 2.5.3, il suffit d'imposer une forme quelconque sur le polygone pour que la spline l'épouse. Estimer une fonction de régression sous contraintes par les B-splines peut se faire en contrôlant la forme de la spline par des points de contrôle n'appartenant pas à la courbe de la spline.

Parmi les fonctions de régression les plus modélisées en pratique, figure le cas de fonction croissante, fonction décroissante et fonction unimodale ou plurimodale. Pour un exposé rapide sur les contraintes de forme d'une spline s_k , on présente brièvement, dans ce paragraphe, une série de contraintes. Soit S l'ensemble des vecteurs $\beta = (\beta_i)_{i=1}^{m_k}$ tels que la spline s_k respecte la contrainte de forme. Par exemple, d'après la proposition 2.5.3, si

on impose à la spline s_k d'être croissante, on a :

$$S_{m_k}^{(M)} = \{s_k \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{m_k}\},$$

pour une contrainte unimodale concave, on a :

$$S_{m_k}^{(UC)} = \{s_k \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 < \beta_2, \beta_{m_k-1} > \beta_{m_k}, \beta_i - 2\beta_{i-1} + \beta_{i-2} \leq 0\},$$

et pour une contrainte unimodale, on a :

$$S_{m_k}^{(U)} = \{s_k \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 = \beta_2 < \beta_3 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_{m_k-1} > \beta_{m_k}, \text{ pour } l = 4, \dots, m_k-1\}.$$

Soit l'hypothèse **(H'')** tel que :

(H'') : (i) On considère des nœuds de multiplicité $k+1$ aux deux extrémités du vecteur nodal \mathbf{t} tels que $t_1 = \dots = t_{k+1}$ et $t_{m_k} = \dots = t_{m_k+k}$.

(ii) Les nœuds sont équidistants ($(t_{i+1} - t_i)$ est une constante strictement positive).

Au passage, nous remarquons que l'hypothèse **(H'')**(i) assure que la spline s_k passe ainsi par le premier et le dernier point de contrôle (P_1 et P_{m_k}).

Proposition 2.5.4 *Sous les hypothèses **(H')** et **(H'')**.*

(i) *(Monotone) Soit I_1 obtenu par combinaison linéaire, avec des coefficients non négatifs, des éléments dans $\cup_{m_k=2}^{\infty} S_{m_k}^{(M)}$. Alors l'adhérence de I_1 par la norme uniforme est l'ensemble des fonctions continues et croissantes sur $[a, b]$.*

(ii) *(Unimodale Concave) Soit I_2 obtenu par combinaison linéaire, avec des coefficients non négatifs, des éléments dans $\cup_{m_k=3}^{\infty} S_{m_k}^{(UC)}$. Soit F l'ensemble des fonctions s_k continûment différentiables à valeurs réelles définies sur $[a, b]$ telles que $Ds_k(a) \geq 0$, $Ds_k(b) \leq 0$ et Ds_k est décroissante ($D^2s_k \leq 0$). Pour deux fonctions continûment différentiables g et h , on définit $d(g, h) = \|g - h\|_{\infty} + \|Dg - Dh\|_{\infty}$, avec $\|\cdot\|_{\infty}$ la norme-sup pour les fonctions sur $[a, b]$. Alors l'adhérence de I_2 , sous d , est F .*

(iii) *(Unimodale) Soit $I_3 = \cup_{m_k=4}^{\infty} S_{m_k}^{(U)}$. Soit F l'ensemble des fonctions s_k continûment différentiables à valeurs réelles définies sur $[a, b]$ et qui remplissent les propriétés suivantes : $Ds_k(a) = 0$ et il existe $x^* \in [a, b]$ tel que $Ds_k(x^*) = 0$, $Ds_k(x) \geq 0$ pour $x \in [a, x^*]$ et $Ds_k(x) \leq 0$ pour $x \in [x^*, b]$. Pour deux fonctions continûment différentiables g et h , on définit $d(g, h) = \|g - h\|_{\infty} + \|Dg - Dh\|_{\infty}$, avec $\|\cdot\|_{\infty}$ la norme-sup pour les fonctions sur $[a, b]$. Alors l'adhérence de I_3 , sous d , est F .*

Preuve Sans perte de généralité, nous posons $a = 0$. (i) Il est évident que l'adhérence de I_1 est contenu dans l'ensemble des fonctions continues et croissantes. Pour prouver l'inverse, soit s une fonction continue et croissante. Nous considérons $\beta'_i = s(ib/m_k)$, pour $i = 1, \dots, m_k$, et on pose $C_{\beta', \mathbf{t}} = \left(1 - \frac{t-t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta'_{i-1} + \left(\frac{t-t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta'_i$, pour $t \in [t_i^*, t_{i+1}^*[$, le polygone de contrôle de forme croissante associé à une spline s_k qui est croissante également (d'après la préservation de la monotonie dans la proposition 2.5.3). Alors, le polygone $C_{\beta', \mathbf{t}}$ est dans I_1 . En rajoutant K nœuds, de sorte que le pas entre les nœuds $|\mathbf{t}| \stackrel{\text{déf}}{=} \sup_i(t_{i+1} - t_i) \rightarrow 0$, alors d'après le corollaire 2.3.3 le polygone de contrôle $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ converge vers la spline s_k où $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ est le nouveau polygone obtenu après l'insertion des K nœuds. D'après la proposition 2.4.1, le polygone $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ est dans I_1 comme $C_{\beta', \mathbf{t}}$. Donc, s_k est dans I_1 également.

(ii) Il est évident que $I_2 \subset F$. On pose \bar{I}_2 l'adhérence de I_2 , et par conséquence on a $\bar{I}_2 \subset F$. Pour prouver l'inverse ($F \subset \bar{I}_2$), nous considérons s_k une spline continûment différentiable telle que $s_k \in F$, $\beta'_1 = Ds_k(a) + 1/(m_k)^3$, $\beta'_{m_k-1} = Ds_k(b) - 1/(m_k)^3$, $\beta'_i = Ds_k(ib/(m_k-1))$, pour $i = 2, \dots, m_k-2$, et on associe à Ds_k le polygone de contrôle $C_{\beta', \mathbf{t}} = \left(1 - \frac{t-t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta'_{i-1} + \left(\frac{t-t_i^*}{t_{i+1}^* - t_i^*}\right)\beta'_i$ pour $t \in [t_i^*, t_{i+1}^*[$. D'après le corollaire 2.3.3, en rajoutant K nœuds, de sorte que le pas entre les nœuds $|\mathbf{t}| \stackrel{\text{déf}}{=} \sup_i(t_{i+1} - t_i) \rightarrow 0$, alors le polygone de contrôle $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ converge vers la spline Ds_k où $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ est le nouveau polygone obtenu après l'insertion des K nœuds. Nous posons les coefficients $\beta_1'' = s_k(a)(m_k + K)/b$, $\beta_i'' = \beta_1'' + \beta'_1 + \dots + \beta'_{i-1} + \beta'_i$, pour $i = 1, \dots, m_k + K$, et la spline : $H(t) = b/(m_k + K) \sum_{i=1}^{m_k+K} B_{i,3}(t)\beta_i''$ pour $t \in [a, b]$. En considérant des nœuds équidistants ($t_{i+1} - t_i = \tau_0$) et en choisissant $\tau_0 = b/(m_k + K)$, alors par simple application de la proposition 2.4.4 on obtient la dérivée de la spline $DH(t) = \frac{b}{m_k+K} \frac{(k-1)}{\tau_0(k-1)} \sum_{i=2}^{m_k+K} (\beta_i'' - \beta_{i-1}'')B_{i,(k-1)}(t) = \sum_{i=2}^{m_k+K} \beta'_i B_{i,2}(t) = C_{\beta', \mathbf{t}}^K$. Donc, comme $C_{\beta', \mathbf{t}}^K$ converge vers Ds_k et $C_{\beta', \mathbf{t}}^K = DH$ alors H converge vers s_k . On peut vérifier également que $H(a) = s_k(a)$. La séquence β' , qui a été construite à partir de la dérivée Ds_k , est décroissante avec $\beta'_1 > 0$, $\beta'_{m_k-1} < 0$ et $\beta_i'' - 2\beta_{i-1}'' + \beta_{i-2}'' = \beta'_i - \beta'_{i-1}$. On en déduit que $\beta_2'' - \beta_1'' > 0$, $\beta_{m_k}'' - \beta_{m_k-1}'' < 0$ et $\beta_i'' - 2\beta_{i-1}'' + \beta_{i-2}'' \leq 0$. Alors $H \subset I_2$ et immédiatement on conclut que $s_k \subset \bar{I}_2$.

La démonstration de (iii) est similaire à la preuve (ii) et pour cette raison elle ne sera pas évoquée. \square

Dans le chapitre 3 suivant, nous présentons une méthode de régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme. Nous utilisons une base de B-spline pour modéliser la fonction de régression et nous expliquons comment mettre en œuvre le contrôle de la forme de la fonction de régression grâce à l'inférence bayésienne.

3

La régression bayésienne sous contraintes

Résumé : L'objet de ce chapitre est de proposer un estimateur bayésien d'une fonction de régression sous contrainte de forme et de régularité. Les contraintes sont prises en compte grâce à la loi a priori. Pour construire la distribution a priori sur la fonction de régression, nous utilisons une base de B-spline. La contrainte de régularité sera contrôlée par l'ordre k de la spline. La forme de l'estimateur sera contrôlée grâce au polygone de contrôle. L'estimateur choisi est le mode a posteriori. Il est calculé à partir d'un algorithme de type recuit simulé dont l'étape de proposition garantit l'introduction de la contrainte de forme. Des simulations suivant la loi a posteriori sont obtenues grâce à un algorithme de type Metropolis-Hastings. Nous présentons également une application sur des données réelles.

3.1 Introduction

L'estimation d'une fonction de régression sous des contraintes de régularité et de forme est d'un intérêt considérable dans de nombreuses applications. Les exemples typiques incluent, entre autres, les courbes de doses-réponses en médecine, la construction de la fonction d'utilité, les fonctions de productions dans l'industrie, etc. La fonction qui fournit la meilleure prévision d'une variable dépendante y en fonction d'une variable

indépendante x est l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(y|x) = f(x)$. Cette fonction est appelée fonction de régression et son estimation à partir de n copies indépendantes du couple (x, y) est un problème dans la théorie statistique. Nous considérons le cas où $(x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$.

Pour étudier la régression sous contraintes, différentes approches fréquentiste et bayésienne sont proposées dans la littérature. Globalement, ces approches consistent à étudier une seule contrainte sur un intervalle déterminé par le domaine de définition de la variable indépendante. Dans le cas fréquentiste, la littérature est plutôt large et essentiellement basée sur les méthodes à noyaux et les splines de régression ou les splines de lissage (Wright and Wegman (1980), Villalobos and Wahba (1987), Mukerjee (1988), Mammen (1991), Ramsay (1998), Meyer (2008)). En ce qui concerne les travaux basés sur les splines, la régression sous contrainte de monotonie a été étudiée par Mammen (1991) et Ramsay (1998). Mammen (1991) a utilisé une discrétisation avec des contraintes de lissage et d'isotonisation à chaque étape pour estimer une fonction de régression monotone. Mammen and Thomas-Agnan (1999) ont proposé une méthode pour contraindre les splines de lissage en calculant d'abord la spline de lissage sans restriction puis en projetant la spline dans l'espace contraint en utilisant une norme de type Sobolev. Un travail plus général étudiant l'inférence sous des contraintes de convexité et de monotonie dans la régression spline a été proposé par Meyer (2008). Pour une description des principales méthodes non paramétriques classiques, nous pourrions consulter Delecroix and Thomas-Agnan (2000). Dans le cadre bayésien, les travaux sont plus rares, relativement récents et concernent surtout la régression isotonique. Les deux travaux de Gelfand and Kuo (1991) et Ramgopal et al. (1993) ont proposé une méthode bayésienne sous contraintes pour l'estimation des courbes de dose-réponse. Lavine and Mockus (1995) utilisent un processus de Dirichlet dans une méthode non paramétrique bayésienne pour l'estimation d'une fonction de régression isotonique. Leur méthode fonctionne seulement pour des problèmes d'estimation sous contraintes de monotonie et ne peut pas être utilisée directement en présence de régions plates dans la courbe de dose-réponse. Pour résoudre le problème des régions plates, Holmes and Heard (2003) ont proposé une approche bayésienne pour la régression isotonique en utilisant une fonction constante par morceaux avec des positions et un nombre de nœuds inconnus. Une autre approche différente a été proposée par Neelon and Dunson (2004) donnant une approximation de la fonction de régression par une fonction linéaire par morceaux. Dans ce dernier article, une corrélation entre les pentes a été mise en œuvre grâce à la loi a priori. Cette loi a priori charge les pentes nulles ce qui permet à la méthode de détecter efficacement les régions plates dans la courbe.

Gunn and Dunson (2005) utilisent un modèle bayésien hiérarchique pour modéliser les courbes unimodales. Récemment, Shively and Sager (2009) ont proposé deux approches performantes pour les fonctions de régression monotones et lisses : la première repose sur la caractérisation des fonctions monotones lisses proposée par Ramsay (1998) et la seconde est basée sur les splines de régression avec les bases de puissance tronquées.

Dans ce travail, nous adoptons un cadre bayésien où, pour introduire des connaissances a priori sur la fonction de régression, des contraintes de régularité et de forme seront exprimées grâce à la distribution a priori. Pour obtenir une régression lisse, on propose l'utilisation des B-splines. La régression avec les B-splines assure une estimation lisse, flexible et parcimonieuse. La construction de la base B-spline dépend essentiellement d'un paramètre crucial appelé le vecteur nodal. Il est connu que la régression B-spline est sensible au nombre et aux positions des nœuds (Meyer, 2008). La méthode proposée est basée sur la modélisation de la fonction de régression par une spline engendrée par la base B-spline. La forme de la courbe estimée est contrôlée simplement à partir de ses coefficients dans la base B-spline. Ce dernier résultat est obtenu par l'intermédiaire du polygone de contrôle dont la définition et certaines propriétés sont données dans le Chapitre 2. Malgré la prise en compte de contraintes dans la loi a priori, il reste possible de dériver une expression analytique à une constante près de la loi a posteriori. Contrairement à la régression bayésienne sans contraintes, il n'est plus possible de calculer directement l'estimateur. Nous estimons f par le mode a posteriori, car contrairement à l'espérance a posteriori, il vérifie nécessairement les contraintes de forme. Précisément, ce mode est calculé par un algorithme de type recuit simulé qui permet de prendre en compte la contrainte de forme dans l'étape de proposition. Un intervalle de crédibilité est obtenu à partir de simulations suivant un algorithme de type Metropolis-Hastings avec la même étape de proposition.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans une première partie, nous présentons le modèle de régression sous contraintes. Nous expliquons comment les contraintes sont prises en compte grâce à la loi a priori. Une attention particulière est attachée à l'importance du polygone de contrôle pour ajuster la tendance de la courbe modélisée. Dans une deuxième partie, nous abordons les spécificités de l'inférence bayésienne. Dans cette perspective, après avoir dérivé la densité a posteriori, nous expliquons par une étude de simulation comment mettre en avant les principaux concepts et leur mise en œuvre pratique. Enfin, nous illustrons par une application comment reconstruire des courbes d'acidification (diminution de pH).

3.2 Le modèle

Le problème majeur de la régression est la détermination de la relation entre un vecteur de réponse $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ et un vecteur explicatif $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$. Le modèle de régression classique reliant les deux variables est le suivant :

$$y_j = f(x_j) + \varepsilon_j, \quad j = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

où f est une fonction inconnue et $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)'$ est l'erreur de distribution Normale d'espérance nulle $\varepsilon_j \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$ où $\sigma^2 < \infty$. Nous introduisons une modélisation de f dans le modèle (3.1) moyennant les B-splines étudiées dans le Chapitre 2. Pour $0 < a < b < \infty$, on suppose que $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ est donnée par la combinaison linéaire des fonctions B-splines suivante :

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m_k} B_{ik}(x)\beta_i, \quad \forall x \in [a, b]. \quad (3.2)$$

En combinant (3.1) et (3.2) nous obtenons le modèle qui tient compte de la modélisation de la fonction f par les fonctions B_{ik} :

$$\begin{cases} y_j = f(x_j) + \varepsilon_j, & j = 1, \dots, n, \\ f(x) = \sum_{i=1}^{m_k} \beta_i B_{i,k}(x), & \forall x \in [a, b]. \end{cases} \quad (3.3)$$

Les coefficients $\beta_i \in \mathbb{R}$ sont à estimer avec la variance σ^2 . Nous contrôlons la forme de la fonction f par le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$. On rappelle qu'on obtient le polygone de contrôle à partir des coefficients β_i et \mathbf{t}^* définis par (2.11). L'écriture du modèle (3.1) est équivalente à l'écriture en notation matricielle suivante :

$$\mathbf{y} = B\beta + \varepsilon,$$

$$\text{avec } \beta = (\beta_1, \dots, \beta_{m_k})' \text{ et } B = \begin{pmatrix} B_{1,k}(x_1) & \cdots & B_{m_k,k}(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{1,k}(x_n) & \cdots & B_{m_k,k}(x_n) \end{pmatrix}.$$

Dans la suite, nous expliquons comment prendre en compte les informations a priori sur la forme de la fonction de régression grâce à la loi a priori. Nous donnons analytiquement la distribution a priori choisie après la prise en compte de la contrainte de forme et nous montrons qu'il est possible d'obtenir analytiquement, à une constante d'intégration près, la densité de la loi a posteriori.

3.3 Inférence bayésienne

Dans le paradigme bayésien, une probabilité n'est pas interprétée comme le passage à la limite d'une fréquence, mais plutôt comme la traduction numérique d'un état de connaissance. On note par Θ l'ensemble des paramètres inconnus dans le modèle de régression. On désigne par θ un élément générique de Θ . Nous considérons que la loi a priori est de densité de probabilité π par rapport à la mesure de Lebesgue. Soit la notation $p(\cdot)$ qui désigne une densité de probabilité quelconque par rapport à la mesure de Lebesgue. La stratégie de l'inférence bayésienne relative à notre problème de régression consiste à :

- (i) l'établissement de la loi a priori de densité $\pi(\theta)$ pour le paramètre inconnu θ ;
- (ii) l'écriture de la vraisemblance $p(\mathbf{y}|\theta)$ des données $\mathbf{y} = (y_j)_{j=1}^n$ quand on a le paramètre θ ;
- (iii) la détermination de la distribution a posteriori $p(\theta|\mathbf{y})$ du paramètre quand on a les données \mathbf{y} en utilisant le théorème de Bayes

$$p(\theta|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta)}{\int_{\Theta} p(\mathbf{y},\theta)d\theta} \propto p(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta).$$

En supposant que l'erreur est de distribution Normale $\varepsilon \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbb{I}_n)$ où σ^2 est une variance inconnue et \mathbb{I}_n est la matrice identité d'ordre n , alors la vraisemblance conditionnelle des données $\mathbf{y} = (y_j)_{j=1}^n$ sachant les paramètres (β, σ^2) s'écrit de la manière suivante :

$$p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^n \left(y_j - \sum_{i=1}^{m_k} B_{ik}(x_j)\beta_i \right)^2 \right\}.$$

On remarque au passage que, dans un contexte fréquentiste différent de ce qu'on propose, il est possible de maximiser cette vraisemblance sous contraintes afin d'obtenir une estimation des paramètres du modèle à savoir les coefficients β et la variance de la régression σ^2 . Nous discutons ce point à la fin de ce chapitre. Dans la suite, nous retenons l'écriture de la vraisemblance sous la forme matricielle suivante :

$$p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - B\beta)'(\mathbf{y} - B\beta) \right\}. \quad (3.4)$$

La vraisemblance complète des données sachant les paramètres de distribution Normale va servir dans l'inférence bayésienne au calcul de la loi a posteriori. Partant d'une connaissance a priori sur la forme et la régularité de f et des données $(x_j, y_j)_{j=1}^n$, on présente dans la suite le choix du prior en décrivant les distributions de probabilité à introduire dans l'inférence bayésienne pour l'estimation de β et σ^2 .

3.3.1 La loi a priori

La modélisation avec l'approche bayésienne est caractérisée par une loi a priori. Le choix d'une distribution a priori représente l'information disponible sur un paramètre inconnu. La régression bayésienne offre, d'un point de vue théorique, un cadre qui se prête bien à la régression sous contraintes. Précisément, pour introduire une connaissance a priori (par exemple une information géométrique sur la forme de l'estimateur de la fonction de régression) on se sert de la loi a priori pour spécifier des contraintes. Soit S l'ensemble des vecteurs $\beta = (\beta_i)_{i=1}^{m_k}$ tels que f respecte la contrainte de forme. Par exemple, d'après la proposition 2.5.3, si on impose à f d'être croissante, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{m_k}\},$$

pour une régression unimodale concave, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 < \beta_2, \beta_{m_k-1} > \beta_{m_k}, \beta_i - 2\beta_{i-1} + \beta_{i-2} \leq 0\},$$

et pour une régression unimodale, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 = \beta_2 < \beta_3 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_{m_k-1} > \beta_{m_k}, \text{ pour } l = 4, \dots, m_k-1\}.$$

Pour le modèle de régression (3.3), nous considérons la loi Normale Inverse Gamma tronquée à S , qu'on note par $NIG^S(\cdot, \cdot, \cdot, \cdot)$, comme une loi a priori conjuguée pour les paramètres $\theta = \{\beta, \sigma^2\} \sim NIG^S(m, V, \xi, \varsigma)$. On obtient ainsi une loi a priori π^S , conditionnée par la contrainte $f \in S$, dont la densité est donnée, à une constante près, par :

$$\begin{aligned} \pi^S(\beta, \sigma^2) &\propto p(\beta \mid \sigma^2) p(\sigma^2) \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}} \\ &\propto NIG^S(m, V, \xi, \varsigma) \\ &\propto (\sigma^2)^{-(\xi + (m_k/2) + 1)} \times \exp \left\{ - \frac{(\beta - m)' V^{-1} (\beta - m) + 2\varsigma}{2\sigma^2} \right\} \times \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}. \end{aligned}$$

Sans la contrainte $\mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}$, le vecteur m et la matrice V s'interprètent comme l'espérance a priori et la matrice de variance covariance a priori des coefficients β . On rappelle au passage que la distribution de $\sigma^2 \sim IG(\xi, \varsigma)$ est donnée par :

$$p(\sigma^2) = \frac{\varsigma^\xi}{\Gamma(\xi)} (\sigma^2)^{-(\xi+1)} \exp(-\varsigma/\sigma^2), \quad \text{où } \xi, \varsigma > 0.$$

où $\Gamma(\xi)$ représente la fonction Gamma.

Ainsi, la loi a priori $\pi^S(\beta, \sigma^2)$ assure que la contrainte de forme est garantie par la fonction indicatrice $\mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}$ et la régularité est contrôlée par l'ordre k de la spline. La contrainte de forme introduit une sorte d'auto-contrôle de la forme par les coefficients β . D'où l'importance du polygone de contrôle $C_{\beta, t}$ dans la mesure où la spline considérée, ou plutôt la fonction de régression inconnue f , épouse les formes au cours de l'inférence statistique. Cela a été démontré dans la proposition 2.5.3 au niveau du Chapitre 2 où la forme de la spline est contrôlée par le polygone de contrôle. D'une manière générale, la variance σ^2 s'interprète comme une mesure de la dispersion dans le modèle. L'idée de ne pas affecter σ^2 à une constante réglée par une méthode quelconque telle que la validation croisée est de réduire la sensibilité de l'inférence aux valeurs de ce paramètre de variance et d'autoriser une certaine incertitude sur σ^2 .

3.3.2 La loi a posteriori

D'après le théorème de Bayes, la loi a posteriori est proportionnelle à la loi a priori $\pi^S(\beta, \sigma^2)$ multipliée par la vraisemblance $p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2)$. Explicitement, la densité a posteriori des paramètres $\{\beta, \sigma^2\}$ sachant les données \mathbf{y} est donnée, à une constante d'intégration près, par :

$$\begin{aligned} p(\beta, \sigma^2 | \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{y} | \beta, \sigma^2) p(\beta | \sigma^2) p(\sigma^2) \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}} \\ &\propto (\sigma^2)^{-(\xi^* + (m_k/2) + 1)} \exp \left\{ - \frac{(\mathbf{y} - B\beta)'(\mathbf{y} - B\beta) + (\beta - m)'V^{-1}(\beta - m) + 2\zeta}{2\sigma^2} \right\} \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}} \\ &\propto (\sigma^2)^{-(\xi^* + (m_k/2) + 1)} \exp \left\{ - \frac{(\beta - m^*)'(V^*)^{-1}(\beta - m^*) + 2\zeta^*}{2\sigma^2} \right\} \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}, \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} m^* &= (V^{-1} + B'B)^{-1}(V^{-1}m + B'\mathbf{y}); \\ V^* &= (V^{-1} + B'B)^{-1}; \\ \xi^* &= \xi + n/2; \\ \zeta^* &= \zeta + \frac{m'V^{-1}m + \mathbf{y}'\mathbf{y} - (m^*)'(V^*)^{-1}m^*}{2}. \end{aligned} \tag{3.5}$$

En interprétant cette loi a posteriori conditionnée par la contrainte $f \in S$, il est facile de voir qu'on retrouve une deuxième fois la loi Normale Inverse Gamma tronquée à S comme loi a posteriori avec une certaine mise à jour sur les paramètres donnée par $(\beta, \sigma^2 | \mathbf{y}) \sim NIG^S(m^*, V^*, \xi^*, \zeta^*)$ où m^*, V^*, ξ^* et ζ^* sont donnés ci dessus par (3.5).

Remarque Nous remarquons que sans la contrainte de forme $\mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}$, dans la loi a posteriori $p(\beta, \sigma^2 | \mathbf{y})$, la mise à jour sur les paramètres s'interprète sans difficulté; m^* et V^* sont respectivement l'espérance a posteriori et la matrice de variance covariance a posteriori des coefficients β . La quantité $\mathbf{y}'\mathbf{y} - (m^*)'(V^*)^{-1}m^*$ est la somme des carrés des résidus de l'ajustement en utilisant l'espérance a posteriori m^* et la quantité ζ^*/ξ^* est approximativement la somme des carrés des résidus lorsque $\xi, \zeta \rightarrow 0$ et $V \rightarrow 0$ (Denison et al., 2002).

Bien qu'on obtient une expression explicite, à une constante près, de la distribution a posteriori des paramètres du modèle, il est impossible d'obtenir directement l'estimateur bayésien. Nous précisons à ce niveau que l'espérance a posteriori m^* ne vérifie pas nécessairement la contrainte de forme S .

La stratégie de l'inférence qu'on propose consiste à estimer f par le mode a posteriori. Dans le calcul de cet estimateur, nous devons vérifier la prise en compte de la contrainte de forme. Pour cela, il paraît utile de recourir à une optimisation par Monte Carlo. Précisément, pour calculer le mode a posteriori, nous utilisons une méthode MCMC d'optimisation de type recuit simulé. Les valeurs à optimiser dans le recuit simulé sont les éléments β_i formant le polygone de contrôle $C_{\beta, \mathbf{t}}$. Conceptuellement, l'implémentation du recuit simulé revient à construire deux étapes. Pour les spécifier, on considère une étape de proposition qui permet l'exploration de l'espace d'états et une étape d'acceptation/rejet. C'est dans l'étape de proposition que la contrainte de forme est vérifiée. Par exemple, la prise en compte de la contrainte de monotonie (la régression isotonique) est réalisée de la façon suivante :

- (i) on choisi au hasard un indice $l \sim \mathcal{U}_{\{1, \dots, m_k\}}$ qui désigne l'élément β_l qui va subir la modification de valeur dans les coefficients β ;
- (ii) une proposition $\tilde{\beta}_l$ sera générée à partir d'une réalisation uniforme de manière à ce que $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{U}_{[\beta_{l-1}, \beta_{l+1}]}$ lorsque $l \in \{1, \dots, m_k\} \setminus \{1, m_k\}$, $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{U}_{[\beta_l^*, \beta_{l+1}]}$ si $l = 1$ et $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{U}_{[\beta_{l-1}, \beta_l^*]}$ si $l = m_k$ avec $\beta_1^* = \beta_1 - \varepsilon'$ et $\beta_{m_k}^* = \beta_{m_k} + \varepsilon'$ où ε' est une constante à régler dans les simulations qui assure le bon fonctionnement des transitions;
- (iii) étape d'acceptation/rejet :
 - a. $\beta_l \leftarrow \tilde{\beta}_l$ si la proposition $\tilde{\beta}_l$ est acceptée;
 - b. $\beta_l \leftarrow \beta_l$ si la proposition $\tilde{\beta}_l$ est rejetée.

L'algorithme est itéré N fois. D'autres exemples d'algorithmes peuvent être proposés pour vérifier d'autres types de contraintes S telles que la décroissance, l'unimodalité, la concavité, la convexité, etc. Pour une contrainte quelconque S , elle sera garantie grâce à l'étape

de proposition et définie de la manière suivante : à partir de la valeur β^t à l'itération t de l'algorithme, on propose de remplacer β^t par $\tilde{\beta} = (\beta_1^t, \dots, \beta_{l-1}^t, \tilde{\beta}_l, \beta_{l+1}^t, \dots, \beta_{m_k}^t)'$ tel que :

(i) $l \sim \mathcal{U}_{\{1, \dots, m_k\}}$, tirage de la composante de β^t à modifier ;

(ii) $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{U}_{\{S(\beta^t, l) \cap [\beta_l^t \pm \varepsilon]\}}$ où $S(\beta^t, l) = \{\tilde{\beta}_l : (\beta_1^t, \dots, \beta_{l-1}^t, \tilde{\beta}_l, \beta_{l+1}^t, \dots, \beta_{m_k}^t)' \in S\}$,

où la constante ε'' permet de contrôler la variance de la proposition. La valeur initiale β^1 peut être choisie selon un examen visuel des données $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$.

On propose dans la suite d'étudier l'algorithme de type recuit simulé afin de calculer le mode a posteriori. Pour spécifier les difficultés que nous rencontrons dans l'optimisation par le recuit simulé, nous remarquons que la maximisation de la loi a posteriori $p(\beta, \sigma^2 | \mathbf{y})$ se ramène à minimiser la quantité :

$$Q(\beta) = (\beta - m^*)'(V^*)^{-1}(\beta - m^*), \quad (3.6)$$

en considérant $Q(\cdot)$ une fonction réelle définie sur un sous-ensemble fermé borné de \mathbb{R}^{m_k} . Alors, pour calculer le mode, il suffit de trouver l'argument minimum β^* :

$$\beta^* = \arg \min_{\beta \in S} Q(\beta).$$

L'algorithme de recuit simulé a été introduit par Metropolis et al en 1953 pour minimiser un critère sur un ensemble fini de très grande taille (Robert and Casella, 2004). Depuis cette date, il a été utilisé pour optimiser sur un ensemble continu. L'idée de recuit simulé consiste à un déplacement rapide sur la surface de la fonction Q à minimiser tout en évitant l'attraction intense des minima locaux. Étant donné un paramètre dit de température T_t , on génère ainsi des valeurs $\beta^{(1)}, \beta^{(2)}, \dots$ qui seront acceptées ou rejetées selon le taux $\exp(-Q(\beta^{(t)})/T_t)$. A mesure que $T_t \rightarrow 0$, les valeurs simulées seront situées dans un voisinage des minima globaux de la fonction Q . De nombreux articles et ouvrages ont considéré la détermination pratique de la suite T_t en fonction des itérations t du recuit simulé (Geman and Geman, 1984; Mitra et al., 1986; Bartoli and DelMoral, 2001). Dans sa mise en œuvre, l'algorithme du recuit simulé modifie la température T_t à chaque itération. On note la distribution de proposition par $\mathcal{P}_{\beta_l^{(t)}}^S$, l'algorithme du recuit est alors de la forme :

À l'itération t , l'algorithme est à l'état $\beta^{(t)}$

pour $t = 1, 2, \dots$ **faire**

1. Tirer l à partir d'une distribution uniforme sur $\{1, \dots, m_k\}$
2. Générer $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{P}_{\beta_l^{(t)}}^S$ et on pose $\zeta = (\beta_1, \dots, \tilde{\beta}_l, \dots, \beta_{m_k})$
3. $\rho_t \leftarrow \exp \left\{ -\frac{Q(\zeta) - Q(\beta^{(t)})}{T_t} \right\} \wedge 1$

si acceptation avec probabilité ρ_t **alors**

$\beta^{(t+1)} \leftarrow \zeta$ (avec probabilité ρ_t)

sinon

$\beta^{(t+1)} \leftarrow \beta^{(t)}$ (avec probabilité $1 - \rho_t$)

fin si

4. Diminuer T_t en T_{t+1} .

fin pour

ALG. 1: *Algorithme de recuit simulé.*

Il est clair que la distribution de proposition $\mathcal{P}_{\beta_l^{(t)}}^S$ assure la proposition de valeur ζ vérifiant nécessairement les contraintes à chaque itération. L'étape d'acceptation/rejet arbitre les propositions intéressantes à retenir dans les simulations pour les éléments du vecteur $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_{m_k})'$.

3.3.3 Convergence du recuit simulé

Certaines notations dans cette section se présentent comme suit : on note par (E, \mathcal{E}) , où $E \subset \mathbb{R}^{m_k}$, un espace mesurable. Pour deux mesures de probabilités, λ_1 et λ_2 sur \mathcal{E} , la variation totale s'écrit $\|\lambda_1 - \lambda_2\|_{TV} \stackrel{\text{déf}}{=} \sup_{A \in \mathcal{E}} |\lambda_1(A) - \lambda_2(A)|$. On note également par $K_1 K_2$ le noyau de Markov défini comme la composée des noyaux markoviens K_1 et K_2 et qui s'écrit $(K_1 K_2)(\beta, d\tilde{\beta}) \stackrel{\text{déf}}{=} \int_E K_1(\beta, du) K_2(u, d\tilde{\beta})$. Si $K_1 = K_2$, on utilise K_1^2 . Pour une fonction bornée mesurable g , ses oscillations sont $\text{osc}(g) = \sup_{(\beta, \tilde{\beta}) \in E^2} |g(\beta) - g(\tilde{\beta})|$. On note par $\delta_\beta(d\tilde{\beta})$ la mesure de Dirac. Pour désigner un vecteur sans l'élément β_l , nous utilisons $\beta_{-l} = (\beta_1, \dots, \beta_{l-1}, \beta_{l+1}, \dots, \beta_{m_k})'$.

La convergence de l'algorithme de recuit simulé dépend essentiellement d'un noyau de transition $K(\beta, d\tilde{\beta})$ et du choix du paramètre de température T_t . Pour une étude autour

des propriétés de convergence du recuit simulé, on pourra se référer à l'ouvrage de Bartoli and DelMoral (2001). On propose une étude de convergence de l'algorithme 1 dans la suite où, concernant le paramètre de température T_t , on choisit l'inverse d'une variation logarithmique :

$$T_t = \frac{\alpha}{\log(t + e)}. \quad (3.7)$$

Remarque La constante $\alpha < \infty$ détermine la température initiale $T_0 = \alpha$. Si α est choisie trop petite, cela pourrait conduire l'algorithme dans des pièges tels les extrema locaux. Inversement si α est choisie trop grande, la valeur initiale de température serait trop élevée. Une telle initialisation ralentirait la convergence de l'algorithme. Le choix de la constante optimale α s'exprime en fonction de la transition K et des profondeurs des pièges éventuels lorsque l'espace d'état E est fini (Bartoli and DelMoral, 2001). Nous poserons $\alpha > \eta \text{osc}(Q)$ où $\eta \geq 1$.

Nous supposons que l'ensemble E est un sous-espace borné de \mathbb{R}^{m_k} ce qui permet l'utilisation de la distribution uniforme sur E . Dans le cas où l'ensemble E n'est pas borné, d'autres distributions de probabilités peuvent être utilisées. On rappelle que $Q(\cdot)$ est la fonction objectif de l'optimisation permettant le calcul du mode a posteriori β^* .

Soit \mathcal{C} un compact de \mathbb{R}^{m_k} , nous définissons l'ensemble E par

$$E \stackrel{\text{déf}}{=} \left\{ \beta = (\beta_1, \dots, \beta_{m_k}) \in \mathcal{C} : \beta \in S \right\}. \quad (3.8)$$

Pour tout $\beta \in E$ et $l \in \{1, \dots, m_k\}$, nous définissons

$$E_{\beta,l} \stackrel{\text{déf}}{=} \left\{ \beta_l \in \mathbb{R} : (\beta_1, \dots, \beta_{l-1}, \beta_l, \beta_{l+1}, \dots, \beta_{m_k})' \in S \right\}. \quad (3.9)$$

L'algorithme de recuit simulé est un algorithme markovien non homogène. Il se présente comme une méthode de recherche aléatoire des extrema globaux d'une fonction numérique

$$Q : E \rightarrow \mathbb{R}_+,$$

définie sur l'espace mesurable (E, \mathcal{E}) . On ne fera aucune hypothèse de régularité sur cette fonction. On supposera uniquement que ses oscillations sont bornées

$$\text{osc}(Q) = \sup_{(\beta, \tilde{\beta}) \in E^2} \left(|Q(\beta) - Q(\tilde{\beta})| \right) < \infty.$$

L'exploration aléatoire de l'espace d'état sera définie à l'aide d'un noyau de transition markovien $K(\beta, d\tilde{\beta})$ sur E ayant les deux propriétés (i) et (ii) dans la proposition 3.3.1 suivante.

Proposition 3.3.1 (Bartoli and DelMoral (2001)) *On note par $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ la chaîne de Markov associée à l'algorithme de recuit simulé de noyau de transition K . On supposera que :*

- (i) *il existe une mesure de probabilité λ sur \mathcal{E} qui soit réversible pour K . Autrement dit la mesure $\lambda(d\beta)K(\beta, d\tilde{\beta})$ est symétrique*

$$\lambda(d\beta)K(\beta, d\tilde{\beta}) = \lambda(d\tilde{\beta})K(\tilde{\beta}, d\beta);$$

- (ii) *il existe un entier $\eta \geq 1$, un nombre $\varepsilon''' > 0$ et une mesure de probabilité auxiliaire γ sur \mathcal{E} tels que*

$$\forall(\beta, A) \in E \times \mathcal{E}, \quad K^\eta(\beta, A) \geq \varepsilon''' \gamma(A).$$

En prenant $T_t = \alpha / \log(t + e)$ où $\alpha > \eta \text{osc}_K(Q)$, alors, pour tout $\varepsilon''' > 0$ et pour toute mesure λ sur \mathcal{E} , on a

$$\mathbb{P}(X_t \in Q_\lambda^{\varepsilon'''}) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 1, \quad (3.10)$$

où

$$Q_\lambda^{\varepsilon'''} = \left\{ \beta \in E, Q(\beta) \leq \text{essinf}_\lambda(Q) + \varepsilon''' \right\}, \quad (3.11)$$

et

$$\text{essinf}_\lambda(Q) = \min_E Q = \sup \left\{ c \geq 0, \lambda(c \leq Q) = 1 \right\}. \quad (3.12)$$

Pour la preuve de la Proposition 3.3.1, nous renvoyons le lecteur à Bartoli and DelMoral (2001, p. 192).

On note par $d\beta_l$ la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R} et on pose

$$\Lambda = \int_E d\beta_1 \cdots d\beta_{m_k} \quad \text{et} \quad \Lambda_{\beta,l} = \int_{E_{\beta,l}} d\beta_l.$$

Pour tout $(\beta, \tilde{\beta}) \in E^2$, le noyau de transition K de la chaîne de Markov $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ est défini par :

$$\begin{aligned} K(\beta, d\tilde{\beta}) &= (m_k)^{-1} \sum_{l=1}^{m_k} \tilde{K}_l(\beta, d\tilde{\beta}) \\ &= (m_k)^{-1} \sum_{l=1}^{m_k} \left(\left[\prod_{l' \neq l} \delta_{\beta_{l'}}(d\tilde{\beta}_{l'}) \right] K_l(\beta_{-l}, d\tilde{\beta}_l) \right), \end{aligned} \quad (3.13)$$

où le noyau $K_l(\beta_{-l}, d\tilde{\beta}_l) = \Lambda_{\beta,l}^{-1} \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) d\tilde{\beta}_l$ et $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \dots, \tilde{\beta}_{m_k})'$. Pour β fixé, le noyau de transition $K_l(\beta_{-l}, d\tilde{\beta}_l)$ est de distribution uniforme sur $E_{\beta,l}$. La mesure $\lambda(d\beta)$ est la distribution uniforme sur E :

$$\lambda(d\beta) = \Lambda^{-1} \mathbf{1}_E(\beta) \prod_{l=1}^{m_k} d\beta_l. \quad (3.14)$$

Nous proposons dans la suite de voir si l'optimisation de type recuit simulé, avec comme noyau de proposition K défini par (3.13), vérifie bien les propriétés de convergence (i) et (ii) énoncées au niveau de la proposition 3.3.1. Pour cela, nous proposons dans la suite deux propositions dont les détails de leurs preuves sont adaptées à notre cas à partir des démonstrations proposées par Abraham (2007).

Proposition 3.3.2 *La mesure $\lambda(d\beta)K(\beta, d\tilde{\beta})$ est symétrique. Pour tout $\beta \in E$, on a*

$$\lambda(d\beta)K(\beta, d\tilde{\beta}) = \lambda(d\tilde{\beta})K(\tilde{\beta}, d\beta). \quad (3.15)$$

Preuve Nous remarquons que pour démontrer la proposition 3.3.2, il suffit de vérifier, que pour tout $l \in \{1, \dots, m_k\}$, on a $\tilde{K}_l(\beta, d\tilde{\beta})\lambda(d\beta) = \tilde{K}_l(\tilde{\beta}, d\beta)\lambda(d\tilde{\beta})$. En utilisant l'écriture (3.13) du noyau $\tilde{K}_l(\beta, d\tilde{\beta})$ et (3.14) de la mesure $\lambda(d\beta)$, on peut écrire

$$\begin{aligned} \lambda(d\beta)\tilde{K}_l(\beta, d\tilde{\beta}) &= \left(\Lambda^{-1} \mathbf{1}_E(\beta) \prod_{l=1}^{m_k} d\beta_l \right) \left(\left[\prod_{l' \neq l} \delta_{\beta_{l'}}(d\tilde{\beta}_{l'}) \right] \Lambda_{\beta,l}^{-1} \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) d\tilde{\beta}_l \right) \\ &= \Lambda^{-1} \Lambda_{\beta,l}^{-1} \mathbf{1}_E(\beta) \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) \left[\prod_{l' \neq l} \delta_{\beta_{l'}}(d\tilde{\beta}_{l'}) d\beta_{l'} \right] d\beta_l d\tilde{\beta}_l. \end{aligned}$$

Nous posons $\omega_1(\beta, \tilde{\beta}) = \Lambda^{-1} \Lambda_{\beta,l}^{-1} \mathbf{1}_E(\beta) \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l)$ et $\omega_2(d\beta, d\tilde{\beta}) = \left[\prod_{l' \neq l} \delta_{\beta_{l'}}(d\tilde{\beta}_{l'}) d\beta_{l'} \right] d\beta_l d\tilde{\beta}_l$. Alors, pour ω_2 -presque sûrement, on a $\beta_{l'} = \tilde{\beta}_{l'}$ pour tout $l' \neq l$. Ainsi, pour ω_2 -presque sûrement, on a $E_{\beta,l} = E_{\tilde{\beta},l}$ et $\Lambda_{\beta,l} = \Lambda_{\tilde{\beta},l}$. On en déduit que

$$\mathbf{1}_E(\beta) \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) = \mathbf{1}_E(\beta) \mathbf{1}_E(\tilde{\beta}) = \mathbf{1}_E(\tilde{\beta}) \mathbf{1}_{E_{\tilde{\beta},l}}(\beta_l).$$

Alors, $\omega_1(\beta, \tilde{\beta}) = \omega_1(\tilde{\beta}, \beta)$ ω_2 -presque sûrement et on termine la preuve en remarquant l'égalité

$$\omega_2(d\beta, d\tilde{\beta}) = \omega_2(d\tilde{\beta}, d\beta). \quad (3.16)$$

□

Soit F_{m_k} l'ensemble des permutations de $\{1, \dots, m_k\}$ et $\nu \in F_{m_k}$. On note par $\tilde{K}_\nu(\beta, d\tilde{\beta})$ la composition des noyaux de transition associés à chaque permutation :

$$\begin{aligned} \tilde{K}_\nu(\beta, d\tilde{\beta}) &= K_{\nu(1)}((\beta_{\nu(2)}, \dots, \beta_{\nu(m_k)}), d\tilde{\beta}_{\nu(1)}) K_{\nu(2)}((\tilde{\beta}_{\nu(1)}, \beta_{\nu(3)}, \dots, \beta_{\nu(m_k)}), d\tilde{\beta}_{\nu(2)}) \\ &\quad \dots K_{\nu(m_k)}((\tilde{\beta}_{\nu(1)}, \dots, \tilde{\beta}_{\nu(m_k-1)}), d\tilde{\beta}_{\nu(m_k)}) \\ &\propto \mathbf{1}_{D_{\nu, \beta}}(\tilde{\beta}) \prod_{l=1}^{m_k} d\tilde{\beta}_l, \end{aligned}$$

où $D_{\nu, \beta}$ est le support du noyau $\tilde{K}_\nu(\beta, d\tilde{\beta})$. Le noyau $\tilde{K}_\nu(\beta, d\tilde{\beta})$ est de distribution uniforme. On pose la constante $\Lambda_{\nu, \beta} = \int_{D_{\nu, \beta}} d\beta_1 \dots d\beta_{m_k}$ et on obtient :

$$\tilde{K}_\nu(\beta, d\tilde{\beta}) = \Lambda_{\nu, \beta}^{-1} \mathbf{1}_{D_{\nu, \beta}}(\tilde{\beta}) \prod_{l=1}^{m_k} d\tilde{\beta}_l. \quad (3.17)$$

Proposition 3.3.3 *Si $\cup_{\nu \in F_{m_k}} D_{\nu, \beta} \supset E$ pour tout $\beta \in E$, alors on a*

$$K^{m_k}(\beta, d\tilde{\beta}) \geq (m_k)^{-m_k} \lambda(d\tilde{\beta}). \quad (3.18)$$

Preuve Pour démontrer (3.18), nous considérons les notations suivantes : $\beta = \beta^{[0]}$ et $\tilde{\beta} = \beta^{[m_k]}$. On a

$$\begin{aligned} K^{m_k}(\beta, d\tilde{\beta}) &= K^{m_k}(\beta^{[0]}, d\beta^{[m_k]}) \\ &= \int \dots \int K(\beta^{[0]}, d\beta^{[1]}) \dots K(\beta^{[m_k-1]}, d\beta^{[m_k]}) \\ &= m_k^{-m_k} \sum_{l_1=1}^{m_k} \dots \sum_{l_{m_k}=1}^{m_k} \int \dots \int \tilde{K}_{l_1}(\beta^{[0]}, d\beta^{[1]}) \dots \tilde{K}_{l_{m_k}}(\beta^{[m_k-1]}, d\beta^{[m_k]}) \\ &\geq m_k^{-m_k} \sum_{\nu \in F_{m_k}} \tilde{K}_\nu(\beta^{[0]}, d\beta^{[m_k]}). \end{aligned} \quad (3.19)$$

D'après la relation (3.17), nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \sum_{\nu \in F_{m_k}} \tilde{K}_\nu(\beta^{[0]}, d\beta^{[m_k]}) &= \sum_{\nu \in F_{m_k}} \Lambda_{\nu, \beta}^{-1} \mathbf{1}_{D_{\nu, \beta}}(\tilde{\beta}) d\tilde{\beta} \\ &\geq \Lambda^{-1} \left[\sum_{\nu \in F_{m_k}} \mathbf{1}_{D_{\nu, \beta}}(\tilde{\beta}) \right] d\tilde{\beta} \quad \text{puisque : } D_{\nu, \beta} \subset E, \Lambda_{\nu, \beta} \leq \Lambda \\ &\geq \Lambda^{-1} \mathbf{1}_E(\tilde{\beta}) d\tilde{\beta} \quad \text{puisque : } \cup_{\nu \in F_{m_k}} D_{\nu, \beta} \supset E \\ &= \lambda(d\tilde{\beta}). \end{aligned} \quad (3.20)$$

On termine ainsi la preuve en combinant les deux égalités (3.19) et (3.20) pour avoir $K^{m_k}(\beta, d\tilde{\beta}) \geq (m_k)^{-m_k} \lambda(d\tilde{\beta})$. \square

3.3.4 Simulations par Metropolis-Hastings avec Gibbs

Afin de construire des bandes de confiances pour le mode a posteriori obtenu par le recuit simulé, des simulations suivant la loi a posteriori peuvent être réalisées par un algorithme de type Metropolis-Hastings. En particulier, nous considérons une version hybride du Metropolis-Hastings avec l'échantillonnage de Gibbs. Sous la loi a priori π^S , la loi a posteriori pour (β, σ^2) est de distribution normale inverse gamma $NIG^S(m^*, V^*, \xi^*, \varsigma^*)$ tronquée à la contrainte S . Soit $N_{m_k}^S$ une distribution normale multivariée tronquée à S . Il est facile de voir que les lois conditionnelles a posteriori pour β et σ^2 sont données par :

$$\beta | \sigma^2, \mathbf{y} \sim N_{m_k}^S(m^*, \sigma^2 V^*), \quad (3.21)$$

$$\sigma^2 | \beta, \mathbf{y} \sim IG\left(\xi^* + m_k/2, (\beta - m^*)'(V^*)^{-1}(\beta - m^*)/2 + \varsigma^*\right). \quad (3.22)$$

Dans l'algorithme 2, nous expliquons la mise en œuvre de ces simulations en utilisant simultanément des étapes d'échantillonneur de Gibbs et des étapes de Metropolis-Hastings.

À l'itération t , l'algorithme est à l'état $(\beta^{(t)}, (\sigma^2)^{(t)})$

pour $t = 1, 2, \dots$ **faire**

1. Générer $(\sigma^2)^{(t+1)}$ à partir de la loi conditionnelle (3.22) sachant $\beta^{(t)}$
2. Tirer l à partir d'une distribution uniforme sur $\{1, \dots, m_k\}$
3. Générer $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{P}_{\beta_l^{(t)}}^S$ et on pose $\tilde{\beta} = (\beta_1, \dots, \tilde{\beta}_l, \dots, \beta_{m_k})$
4. Calculer $\Delta(\tilde{\beta}, \beta^{(t)}) = (\tilde{\beta} - m^*)'(V^*)^{-1}(\tilde{\beta} - m^*) - (\beta^{(t)} - m^*)'(V^*)^{-1}(\beta^{(t)} - m^*)$

5. Prendre $\rho = \left\{ \frac{p(\tilde{\beta}, (\sigma^2)^{(t+1)} | \mathbf{y})}{p(\beta^{(t)}, (\sigma^2)^{(t+1)} | \mathbf{y})} = \exp\left\{-\frac{\Delta(\tilde{\beta}, \beta^{(t)})}{2(\sigma^2)^{(t+1)}}\right\} \right\} \wedge 1$

si acceptation avec probabilité ρ **alors**

$\beta^{(t+1)} = \tilde{\beta}$ (avec probabilité ρ)

sinon

$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)}$ (avec probabilité $1 - \rho$)

fin si

fin pour

ALG. 2: Algorithme de Metropolis-Hastings avec étape de Gibbs.

3.3.5 Convergence du Metropolis-Hastings avec Gibbs

Nous étudions dans la suite théoriquement l'algorithme 2 de type Metropolis-Hastings avec une étape de Gibbs. L'étape de Gibbs a été décrit par l'étape **1.** alors que les étapes du Metropolis-Hastings sont données par les étapes **2.-5.** dans l'algorithme 2. On note par $\mathbf{K}(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta})$ le noyau de transition défini par le remplacement de $\beta^{(t)}$ par $\beta^{(t+1)}$ dans les étapes **2.-5.** dans l'algorithme 2. En utilisant le noyau \mathbf{K} et la distribution conditionnelle a posteriori $\pi^*(d\sigma^2|\beta)$, de σ^2 sachant β et \mathbf{y} , donnée par (3.22), on peut écrire

$$\mathbf{K}^{mh}(\beta, d(\tilde{\beta}, \sigma^2)) = \pi^*(d\sigma^2|\beta)\mathbf{K}(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta}).$$

Pour démontrer que π^* est une distribution invariante pour \mathbf{K}^{mh} , il suffit de prouver que $\pi^*(d\beta|\sigma^2)$ est une distribution invariante pour \mathbf{K} (Chib and Grennberg, 1995, p. 332). On précise que $\pi^*(d\beta|\sigma^2)$ est la distribution conditionnelle a posteriori, de β sachant σ^2 et \mathbf{y} , donnée par (3.21). Par définition de \mathbf{K} , on a

$$\mathbf{K}(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta}) = (m_k)^{-1} \sum_{l=1}^{m_k} \mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta}),$$

où $\mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta})$ est le noyau de transition associé aux étapes **3.** et **5.** dans l'algorithme 2. Ainsi, on peut écrire

$$\mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta}) = \rho_{\mathbf{Q}_l}(\beta, d\tilde{\beta}) + r(\beta)\delta_{\beta}(d\tilde{\beta}),$$

où

$$\begin{aligned} r(\beta) &= 1 - \int \rho_{\mathbf{Q}_l}(\beta, d\tilde{\beta}), \\ \mathbf{Q}_l(\beta, d\tilde{\beta}) &= C_{\beta,l} \mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) d\tilde{\beta}_l \prod_{i \neq l} \delta_{\beta_i}(d\tilde{\beta}_i), \\ C_{\beta,l} &= \left(\mathbf{1}_{E_{\beta,l}}(\tilde{\beta}_l) d\tilde{\beta}_l \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Ainsi, $\mathbf{Q}_l(\beta, d\tilde{\beta})$ change une seule coordonnée d'indice l uniformément sur $E_{\beta,l}$. Pour tous ensembles mesurables A et B , on s'intéresse à démontrer que

$$\int_A \int_B \rho_{\mathbf{Q}_l}(\beta, d\tilde{\beta}) \pi^*(d\beta|\sigma^2) = \int_B \int_A \rho_{\mathbf{Q}_l}(\beta, d\tilde{\beta}) \pi^*(d\beta|\sigma^2). \quad (3.23)$$

La densité de la distribution normale tronquée (3.21) est donnée par

$$\pi^*(d\beta|\sigma^2) = C \mathbf{1}_E(\beta) p^*(\beta|\sigma^2) d\beta,$$

où $p^*(\beta|\sigma^2)$ est la densité normale $N(m^*, \sigma^2 V^*)$, $d\beta = \prod_{i=1}^{m_k} d\beta_i$ est la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^{m_k} et

$$C = \left(\int \mathbf{1}_E(\beta) p^*(\beta|\sigma^2) d\beta \right)^{-1}.$$

On note par \mathbf{m}_l la mesure sur $\mathbb{R}^{m_k} \times \mathbb{R}^{m_k}$ donnée par

$$\mathbf{m}_l(d\beta, d\tilde{\beta}) = d\tilde{\beta} d\beta_l \prod_{i \neq l} \delta_{\tilde{\beta}_i}(d\beta_i) = d\beta_l d\tilde{\beta}_l \prod_{i \neq l} \delta_{\tilde{\beta}_i}(d\beta_i) d\tilde{\beta}_i.$$

Proposition 3.3.4 *Pour tout fonction mesurable $g \geq 0$, on a*

$$\int g(\beta, \tilde{\beta}) \mathbf{m}_l(d\beta, d\tilde{\beta}) = \int g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\beta, d\tilde{\beta}). \quad (3.24)$$

Preuve Pour tous ensembles mesurables A_i et B_i , $i \in \{1, \dots, m_k\}$, il est facile de vérifier que

$$\mathbf{m}_l\left((A_1 \times \dots \times A_{m_k}), (B_1 \times \dots \times B_{m_k})\right) = \left(\int_{A_l} d\beta_l \int_{B_l} d\tilde{\beta}_l \right) \left(\prod_{i \neq l} \int_{A_i \cap B_i} d\beta_i \right).$$

On peut remarquer que (3.24) est vraie pour la fonction g de la forme

$$g(\beta, \tilde{\beta}) = \mathbf{1}_{A_1 \times \dots \times A_{m_k} \times B_1 \times \dots \times B_{m_k}}(\beta, \tilde{\beta}).$$

Comme les ensembles de la forme $(A_1 \times \dots \times A_{m_k}) \times (B_1 \times \dots \times B_{m_k})$ génèrent un σ -algèbre de $\mathbb{R}^{m_k} \times \mathbb{R}^{m_k}$, on en déduit que (3.24) est vraie pour une fonction g de la forme $g(\beta, \tilde{\beta}) = \mathbf{1}_C(\beta, \tilde{\beta})$ et pour tout ensemble mesurable C . Ainsi, par le théorème de Beppo-Levy, on conclut que (3.24) est vraie pour toute fonction $g \geq 0$. \square

En posant

$$g(\tilde{\beta}, \beta) = \left(\frac{p^*(\tilde{\beta}, \sigma^2)}{p^*(\beta, \sigma^2)} \wedge 1 \right) p^*(\beta|\sigma^2) C_{\beta, l} \mathbf{1}_{E_{\beta, l}}(\beta_l) \mathbf{1}_E(\beta),$$

on obtient

$$\rho_{\mathbf{Q}_l}(d\tilde{\beta}, \beta) \pi^*(d\beta|\sigma^2) = g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\tilde{\beta}, d\beta).$$

On précise que le rapport des densités a posteriori est

$$\frac{p^*(\tilde{\beta}, \sigma^2)}{p^*(\beta, \sigma^2)} = \frac{p^*(\tilde{\beta}|\sigma^2)}{p^*(\beta|\sigma^2)},$$

et comme pour tout $i \neq l$ on a $\tilde{\beta}_i = \beta_i$, \mathbf{m}_l -presque sûrement, on obtient, pour \mathbf{m}_l -presque tout $(\tilde{\beta}, \beta)$:

$$\begin{aligned} g(\tilde{\beta}, \beta) &= \left(p^*(\tilde{\beta}, \sigma^2) \wedge p^*(\beta | \sigma^2) \right) C_{\beta, l} C \mathbf{1}_{E_{\beta, l}}(\beta_l) \mathbf{1}_E(\beta) \\ &= \left(p^*(\tilde{\beta}, \sigma^2) \wedge p^*(\beta | \sigma^2) \right) C_{\tilde{\beta}, l} C \mathbf{1}_{E_{\tilde{\beta}, l}}(\beta_l) \mathbf{1}_E(\beta) \\ &= g(\beta, \tilde{\beta}). \end{aligned}$$

Ainsi, pour tous ensembles mesurables A et B , on peut écrire

$$\begin{aligned} \int_A \int_B g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\tilde{\beta}, d\beta) &= \iint \mathbf{1}_A(\beta) \mathbf{1}_B(\tilde{\beta}) g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\tilde{\beta}, d\beta) \\ &= \iint \mathbf{1}_B(\beta) \mathbf{1}_A(\tilde{\beta}) g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\tilde{\beta}, d\beta) \\ &= \int_B \int_A g(\tilde{\beta}, \beta) \mathbf{m}_l(d\tilde{\beta}, d\beta), \end{aligned}$$

et on conclut au finale que l'égalité (3.23) est vraie. En utilisant cette égalité (3.23), on peut réécrire les mêmes lignes que Tierney (1994, p. 1705) :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^{m_k}} \mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, A) \pi^*(d\beta | \sigma^2) &= \int_{\mathbb{R}^{m_k}} \int_A \mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta}) \pi^*(d\beta | \sigma^2) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{m_k}} \int_A \rho \mathbf{Q}_l(\beta, d\tilde{\beta}) \pi^*(d\beta | \sigma^2) + \int_A r(\beta) \pi^*(d\beta | \sigma^2) \\ &= \int_A \int_{\mathbb{R}^{m_k}} \rho \mathbf{Q}_l(\beta, d\tilde{\beta}) \pi^*(d\beta | \sigma^2) + \int_A r(\beta) \pi^*(d\beta | \sigma^2) \\ &= \int_A \left(1 - r(\beta) \right) \pi^*(d\beta | \sigma^2) + \int_A r(\beta) \pi^*(d\beta | \sigma^2) \\ &= \int_A \pi^*(d\beta | \sigma^2). \end{aligned}$$

Donc, $\pi^*(d\beta | \sigma^2)$ est invariante pour $\mathbf{K}_l(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta})$ et par conséquent $\pi^*(d\beta | \sigma^2)$ est aussi invariante pour $\mathbf{K}(\beta, \sigma^2, d\tilde{\beta})$.

Étant donné que \mathbf{K} est également π^* -irréductible et apériodique, on conclut que, pour π^* -presque tout (β, σ^2) ,

$$\|\mathbf{K}^t(\beta, \sigma^2, \cdot) - \pi^*\|_{VT} \rightarrow 0,$$

où on note par $\|\cdot\|_{VT}$ la distance en variation totale. Si \mathbf{K} est Harris-récurrent, alors la convergence en variation totale aura lieu pour tout (β, σ^2) (Tierney, 1994, Théorème 1).

3.3.6 Étude de simulation

Nous proposons dans cette étude de simulation une mise en œuvre de la méthode de régression bayésienne sous contraintes. Nous expliquons à travers trois exemples d'algorithmes, que nous présentons en Annexe de ce chapitre, comment simuler la régression sous contraintes de forme. Les simulations nous permettent d'analyser le comportement de la méthode en générant des observations $(x_j, f(x_j))_{j=1}^n$, où $x_1 \leq \dots \leq x_n$, à partir d'une certaine fonction f . Une fois les données générées, nous supposons que f est inconnue et nous cherchons à l'estimer. Partant du modèle univarié (3.1), on simule un certain nombre n d'observations à partir de $(f(x_j))_{j=1}^n$ et d'un vecteur d'erreur gaussienne $\varepsilon \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbb{I}_n)$. Pour décrire l'étude de simulation considérée, on propose d'expliquer comment générer aléatoirement l'initialisation des algorithmes décrit précédemment.

Contrainte de monotonie. L'algorithme 3 (voir Annexe) sert à la simulation d'une fonction de régression inconnue f_1 sous contrainte de forme monotone. La première étape de l'algorithme consiste à initialiser le vecteur $\beta^{(1)}$ pour apprendre la forme a priori de f . Pour cela, on considère deux densités $q_1(\cdot)$ et $q_2(\cdot)$ dont les supports contiennent respectivement les valeurs $\beta_1^{(1)}$ et $\beta_{m_k}^{(1)}$. Ces densités sont déterminées à partir des observations simulées. Une fois que $\beta_1^{(1)}$ et $\beta_{m_k}^{(1)}$ sont générés, on construit une séquence de valeurs monotones par des simples réalisations uniforme $\mathcal{U}_{[\beta_1^{(1)}, \beta_{m_k}^{(1)}]}$ et l'application de la statistique d'ordre correspondante. Cette séquence initiale vérifie $\beta_1^{(1)} \leq \dots \leq \beta_{m_k}^{(1)}$. Elle sera introduite, en une deuxième étape, pour initialiser le recuit simulé afin de calculer le mode a posteriori.

Contrainte d'unimodalité concave. L'algorithme 4 (voir Annexe) sert à la simulation d'une fonction de régression inconnue f_2 sous contrainte de forme unimodale concave. La première étape consiste à simuler une valeur initiale $\beta_l^{(1)}$ pour le mode de f_2 à partir d'une densité dont le support contient a priori ce mode et à générer les valeurs initiales pour $\beta_1^{(1)}, \dots, \beta_{l-1}^{(1)}, \dots, \beta_{l+1}^{(1)}, \dots, \beta_{m_k}^{(1)}$ à partir d'une réalisation uniforme et la statistique d'ordre. La séquence initiale $\beta^{(1)}$ simulée doit vérifier la contrainte de forme $\beta_2^{(1)} - \beta_1^{(1)} > 0$, $\beta_{m_k}^{(1)} - \beta_{m_k-1}^{(1)} < 0$ et $(\beta_i^{(1)} + \beta_{i-2}^{(1)}) \leq 2\beta_{i-1}^{(1)}$. En deuxième étape, cette séquence sera introduite pour initialiser le recuit simulé.

Contrainte d'unimodalité. L'algorithme 5 (voir Annexe) sert à la simulation d'une fonction de régression inconnue f_3 sous contrainte de forme unimodale. Comme dans

l'algorithme 4, on simule une valeur initiale pour le mode de f_3 et on génère une séquence $\beta^{(1)}$ à partir d'une réalisation uniforme et la statistique d'ordre. La séquence simulée est introduite dans le recuit simulé pour calculer le mode a posteriori.

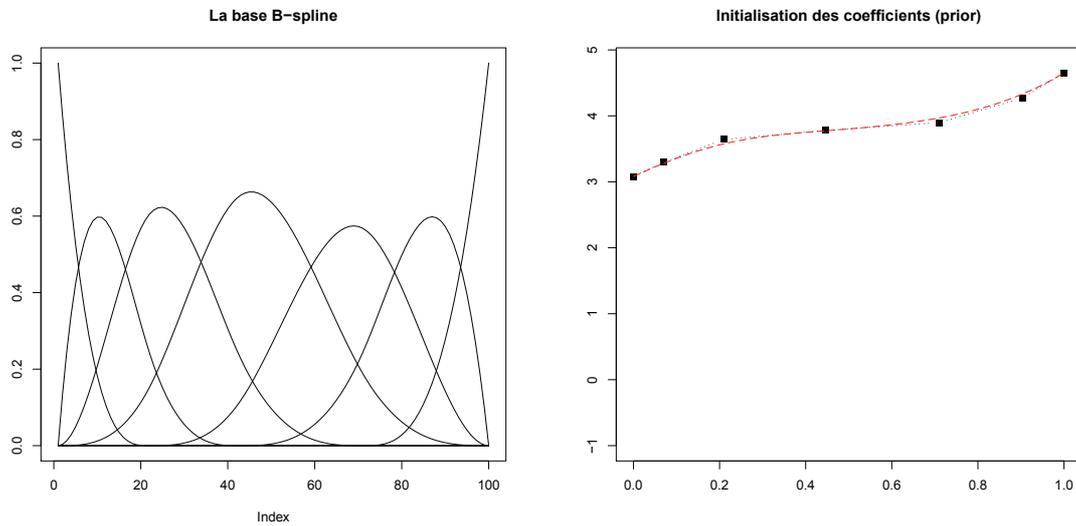
Dans la suite, nous proposons des tests numériques pour analyser la méthode proposée. Pour cela, on propose de tester l'implémentation des algorithmes 3 et 5 moyennant deux fonctions : (i) f_1 : monotone et (ii) f_2 : unimodale.

On a choisi comme exemple les deux fonctions $f_1(x) = 5x^2 \sin(x)$ et $f_2(x) = 5 \sin(x)$. On génère une séquence de valeurs pour le vecteur \mathbf{x} de la manière suivante : $x_j \sim \mathcal{U}[a, b]$ pour $j = 1, \dots, n$. Puis, moyennant la statistique d'ordre appropriée, on trie \mathbf{x} dans un ordre croissant : on obtient $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n | x_1 \leq \dots \leq x_n)$. Le vecteur \mathbf{y} prend les valeurs simulées $y_j \sim \mathcal{N}(f(x_j), \sigma^2)$. Dans cette étude, nous considérons seulement les splines d'ordre $k = 4$ engendrées par la base B-spline. Ce choix se justifie par un compromis entre la simplicité du calcul de la spline d'ordre petit et la contrainte de régularité imposée par la fonction de régression. Le choix des nœuds est arbitraire, mais une fois la séquence nodale choisie, elle demeure fixe tout au long de l'étude de simulation. Donc, pour les nœuds, leurs nombres et leurs positions ne sont pas variables.

Le tableau suivant résume les paramètres de simulation pour les deux fonctions f_1 et f_2 :

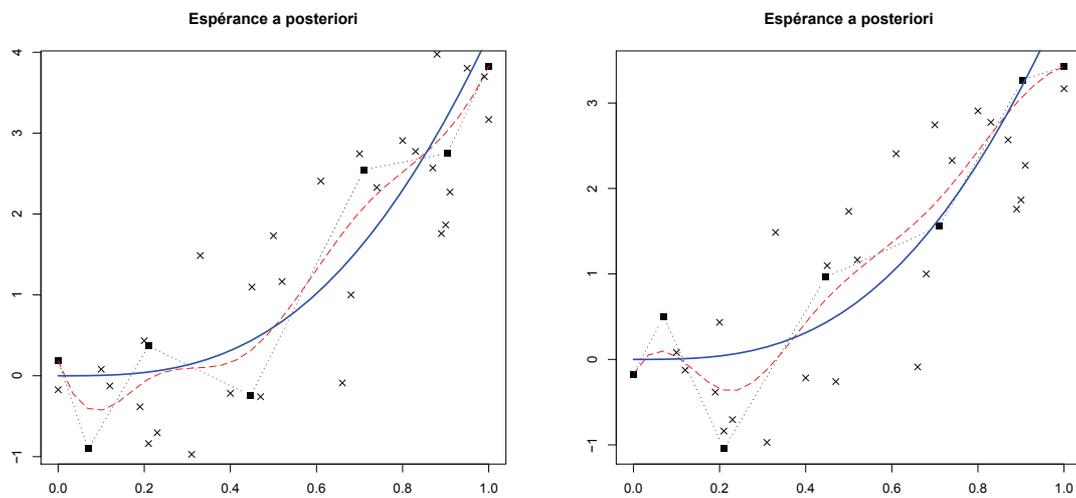
Les paramètres :	n	m_k	k	a	b	m	V	(ξ, ς)
$f_1(x) = 5x^2 \sin(x)$:	30	7	4	0	1	(3.0, 3.3, 3.6, 3.7, 3.8, 4.1, 4.7)'	\mathbb{I}_7	(0.01, 0.01)
$f_2(x) = 5 \sin(x)$:	30	10	4	0	5	(2.4, 6.3, 6.7, 8.8, 4.3, 3.6, 2.4, -0.9, -2.3)'	\mathbb{I}_9	(0.01, 0.01)

Les figures 3.1, 3.2, 3.5 et 3.6 présentent les résultats de simulation relatifs à la fonction f_1 et f_2 . Ces résultats sont obtenus par une implémentation des algorithmes 3 et 5. La première étape de ces algorithmes fournit une séquence $\beta^{(1)}$ (cf. Figures 3.1(b) et 3.5(b)). On peut voir que la spline et son polygone de contrôle ont la même forme dans les Figures 3.1(b) et 3.5(b). Avant de calculer le vecteur des coefficients β par le recuit simulé, on obtient l'espérance a posteriori sans contraintes qui résulte d'une loi a priori non informative $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$ (cf. Figure 3.1(c) et 3.5(c)) et l'espérance a posteriori sans contraintes qui résulte d'une loi a priori informative $(\beta, \sigma^2) \sim NIG$ (cf. Figures 3.1(d) et 3.5(d)). Le mode a posteriori est obtenu par la deuxième étape des algorithmes. Le mode vérifie la contrainte de forme et de régularité comme on peut le voir dans les Figures 3.2(a) et 3.6(a). Pour illustrer le fait que l'espérance a posteriori ne vérifie pas nécessairement la contrainte de forme, on présente la Figure 3.6(b).



(a) La base B-spline (3 nœuds intérieurs)

(b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle



(c) Espérance a posteriori avec prior non informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$

(d) Espérance a posteriori avec prior informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim NIG(m, \mathbb{I}_7, 0.01, 0.01)$

Figure 3.1 – Étude de simulation d’une fonction isotonique : $f(x) = 5x^2 \sin(x)$. Le trait plein (bleu) est la vraie fonction, le trait pointillé (rouge) est l’estimateur, les traits pointillé (noir) sont les polygones de contrôle.

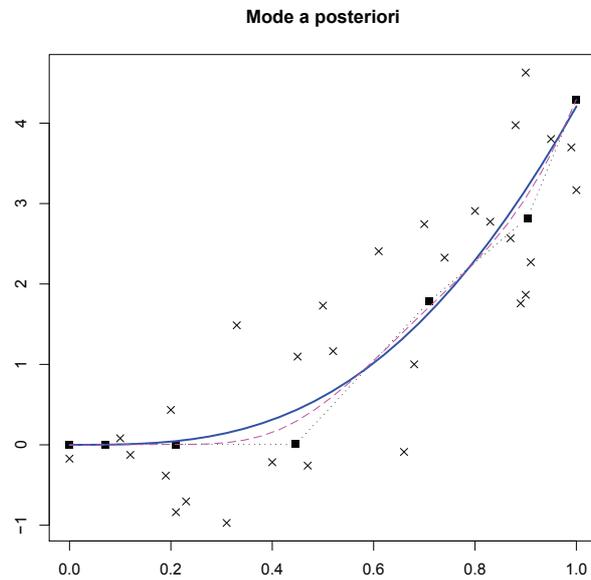
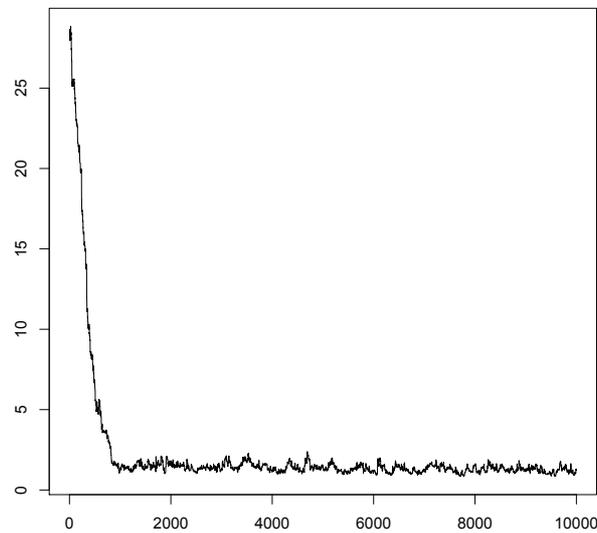
(a) *Mode a posteriori et le polygone de contrôle.*(b) *Minimisation de la fonction $Q(\beta)$ par le recuit simulé.*

Figure 3.2 – Mode a posteriori et convergence du recuit simulé pour l'estimateur de la fonction isotonique : $f(x) = 5x^2 \sin(x)$. Le trait plein (*bleu*) est la vraie fonction, le trait pointillé (*rouge*) est l'estimateur, les traits pointillés (*noir*) sont les polygones de contrôle.

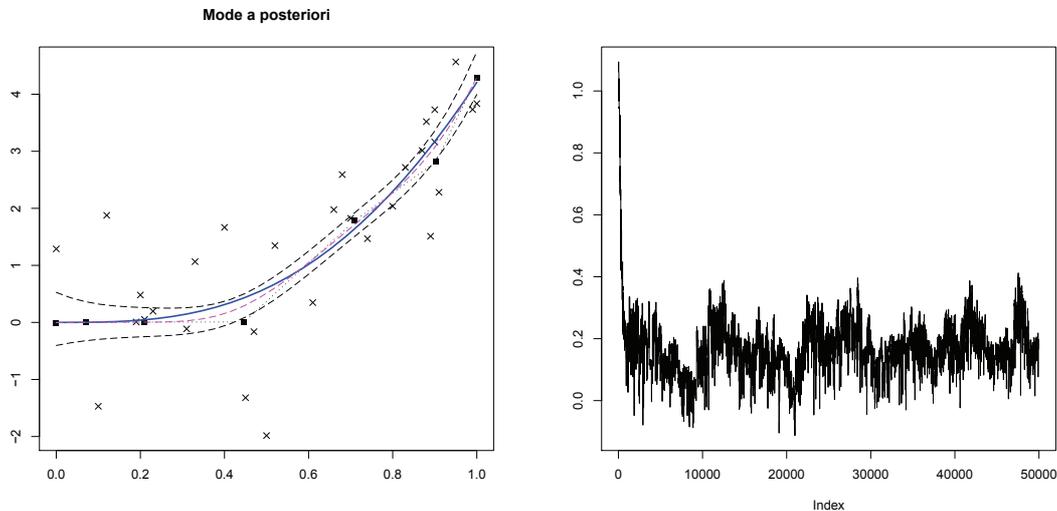
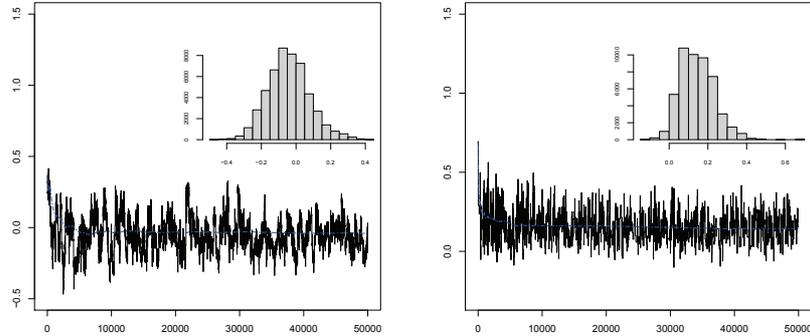


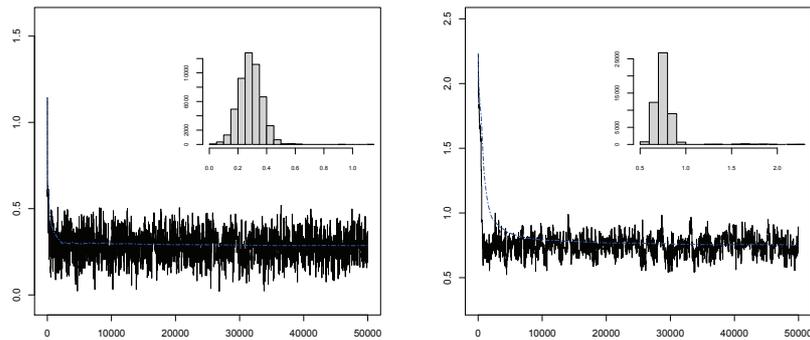
Figure 3.3 – La figure à gauche présente les bandes de confiance à 95% pour le mode a posteriori. Le trait plein (*bleu*) est la vraie fonction, le trait pointillé (*rouge*) est le mode a posteriori, les traits pointillé (*noir*) sont les bandes de confiance à 95%. La figure à droite présente la convergence de la chaîne de simulation de σ^2 par l'échantillonneur de Gibbs.

La figure 3.3 présente les résultats de l'implémentation de l'algorithme 2 de type Metropolis-Hastings couplé à l'échantillonneur de Gibbs pour simuler les bandes de confiances à 95% avec la variance σ^2 et l'algorithme 1 pour calculer le mode a posteriori. Pour obtenir le mode a posteriori, on retient pendant la phase de convergence le vecteur de coefficient β qui minimise Q . Le diagnostic standard des méthodes MCMC, Figures 3.2(b) et 3.4, présente une convergence rapide pour les algorithmes de type recuit simulé (cf. Figure 3.2(b)) et de type Metropolis-Hastings (cf. Figure 3.4). En fait, à partir de 1000 itérations, on détecte la convergence de l'algorithme 2. Pour expliquer la façon d'obtenir les bandes de confiances, on précise que des simulations suivant la distribution a posteriori marginale des coefficients β sont obtenues grâce à l'algorithme de type Metropolis-Hastings. Nous simulons une chaîne de Markov sur un nombre de 500000 itérations et nous retenons seulement les coefficients $\beta^{(N)}$ à chaque pas de $N = 100$ itérations. Cette procédure permet de réduire l'effet de l'auto-corrélation. Alors, selon ce principe, 5000 courbes de régression sont générées pour construire les bandes de confiances à 95%.

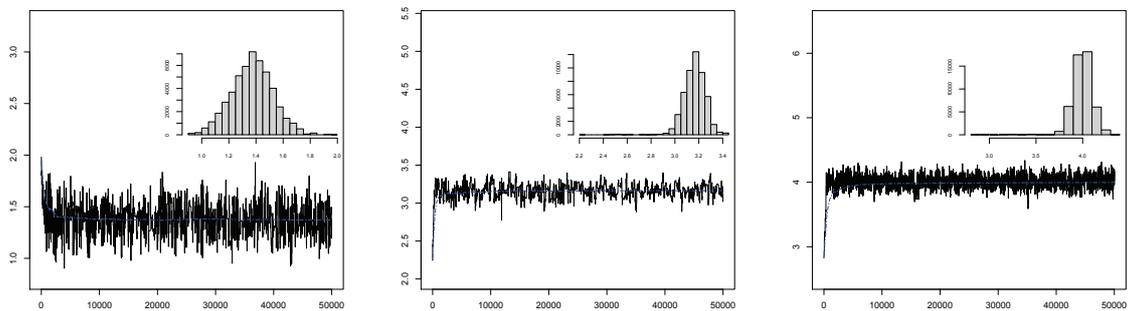
Dans la suite, nous présentons les suites des coefficients $(\beta_i^{(N)})_{i,N=1}^{7,500000}$ simulées par Metropolis-Hastings et les histogrammes correspondants.



(a) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_1 . (b) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_2 .

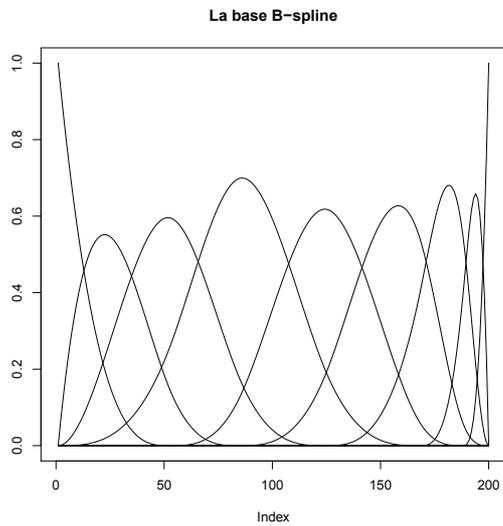


(c) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_3 . (d) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_4 .

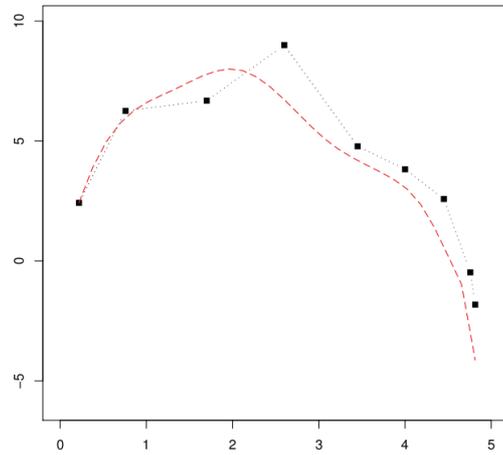


(e) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_5 . (f) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_6 . (g) Simulation par Metropolis-Hastings du coefficient β_7 .

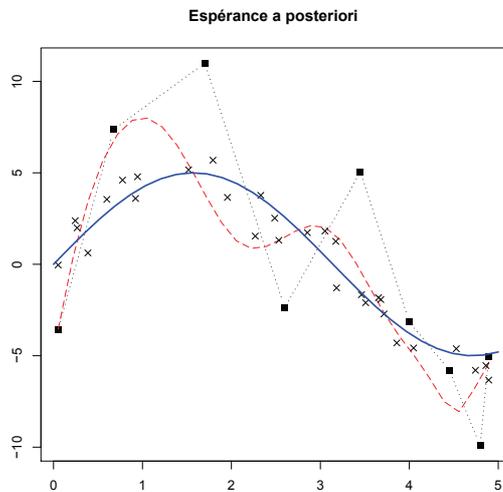
Figure 3.4 – Simulation par Metropolis-Hastings des coefficients β pour la fonction isotonique $f(x) = 5\sin(x)$. Le trait plein (noir) présente la convergence de la chaîne en fonction des itérations et le trait pointillé (bleu) présente l'espérance a posteriori en fonction des itérations avec le prior sous contraintes.



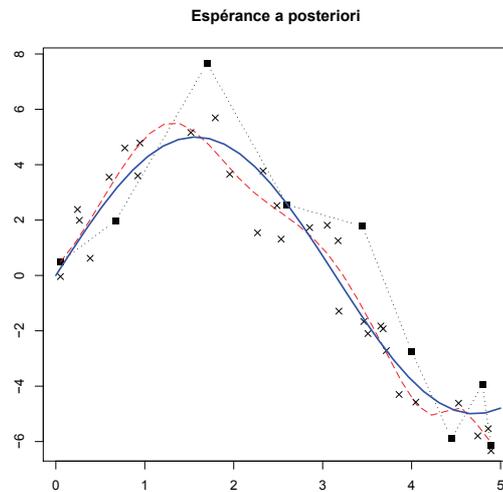
(a) La base B-spline (5 nœuds intérieurs)



(b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle

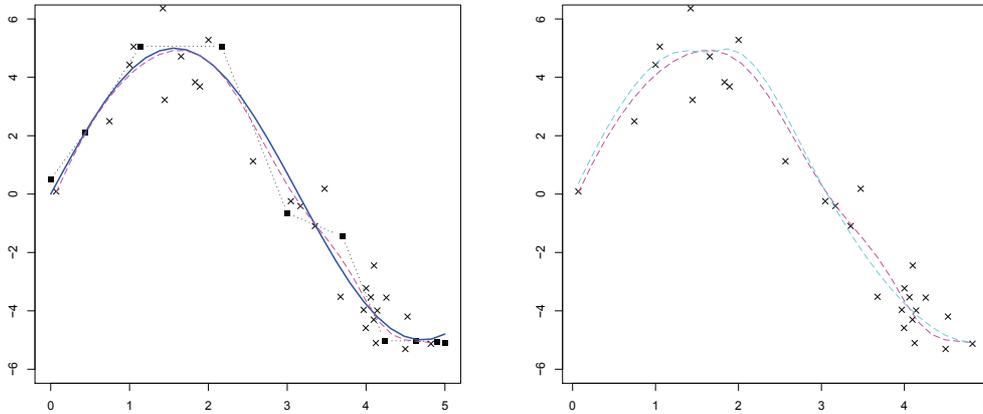


(c) Espérance a posteriori avec prior non informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$



(d) Espérance a posteriori avec prior informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim NIG(m, \mathbb{I}_9, 0.01, 0.01)$

Figure 3.5 – Étude de simulation d’une fonction unimodale : $f(x) = 5 \sin(x)$. Le trait plein (bleu) est la vraie fonction, le trait pointillé (rouge) est l’estimateur, les traits pointillé (noir) sont les polygones de contrôle.



(a) *Mode a posteriori et le polygone de contrôle* (b) *Mode a posteriori et l'espérance a posteriori*

Figure 3.6 – Illustration de la non vérification de la contrainte d'unimodalité par l'espérance a posteriori (Fig.(b) : le trait plein vert) calculé par une moyenne empirique.

3.4 Application à des mesures de pH (projet-Oxyred)

La méthode bayésienne de régression sous contrainte sera appliquée dans cette section sur les données du projet Oxyred. Dans ce projet, une étude récente (Jeanson et al., 2009) a été menée dont l'objectif est l'étude de l'influence du taux d'oxygène dissous initial et du potentiel redox initial sur la croissance de souches de lactocoques et la diminution de pH (acidification) dans le lait. Dans ce but, 4 modalités différentes ont été mises au point en utilisant :

- une modalité saturée en oxygène dissous initial (O_2);
- une modalité dépourvue d'oxygène (N_2);
- une modalité dépourvue d'oxygène et dont le potentiel redox initial a été abaissé au maximum (N_2H_2);
- une modalité intermédiaire avec un niveau moyen d'oxygène et un potentiel redox initial abaissé (O_2H_2).

Ces quatre modalités ont été réalisées dans le lait reconstitué, soit en mini-réacteurs de 200 mL, soit en fermenteurs de 2 L, avec un ensemencement en souches pures de lactocoques. Les cinétiques de croissance, d'acidification, de réduction et de consommation d'oxygène dissous ont été mesurées. Dans cette application, nous considérons seulement

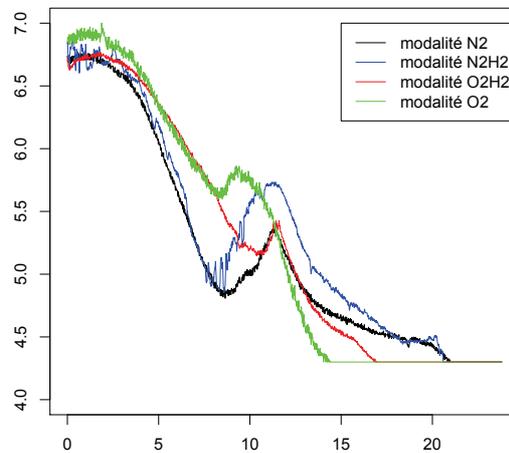
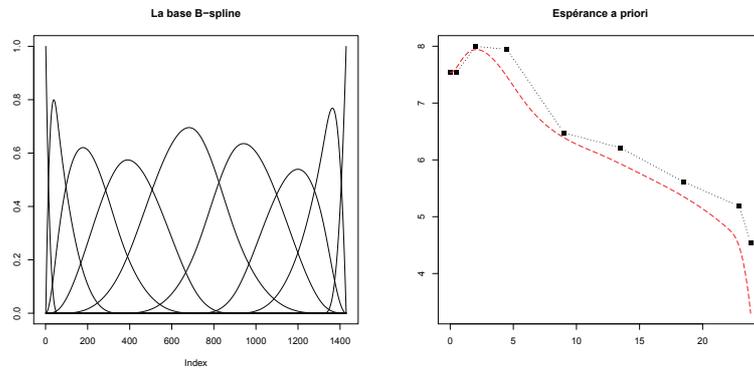


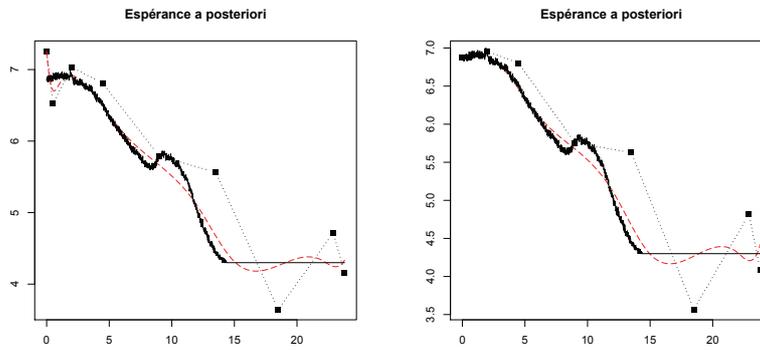
Figure 3.7 – Courbes d’acidification (diminution de pH) au cours du temps pour les quatre modalités (O_2), (N_2), (N_2H_2) et (O_2H_2).

les cinétiques d’acidification pour les quatre modalités en fermenteurs. Les mesures de pH sont effectuées chaque 2 minutes par une électrode. La base de donnée contient 1429 mesures de temps et de pH pour chaque modalité. Dans les fermenteurs, les problèmes d’interférences électriques ont fait remonter le pH au cours des fermentations (cf. Figure 3.7). C’est autour de cette remontée de pH que s’organise l’application de la méthode de la régression bayésienne sous contraintes de forme et de régularité.

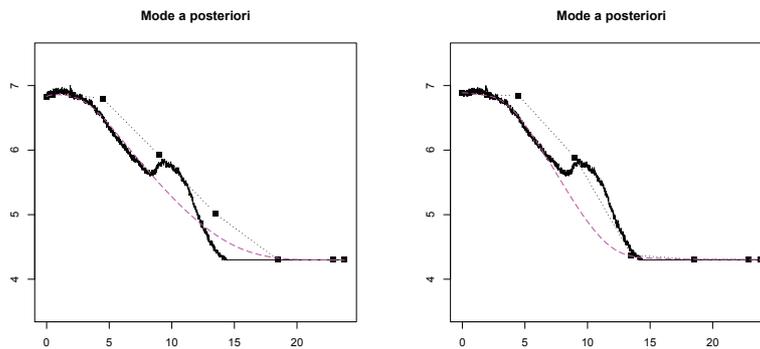
Pour reconstruire les courbes d’acidification, nous proposons d’appliquer la méthode de régression sous contraintes pour les courbes dans la figure 3.7 tout en appliquant les contraintes de formes adéquates. Les résultats de la reconstruction des courbes d’acidification pour les 4 modalités (O_2), (N_2), (N_2H_2) et (O_2H_2) sont présentés respectivement par les figures 3.8, 3.9, 3.10 et 3.11. Pour résoudre les problèmes de forme dans les courbes de la figure 3.7, on en déduit que le mode a posteriori obtenu dans les figures 3.8(e), 3.9(e), 3.10(e) et 3.11(e) optimise une solution qui vérifie un certain compromis entre les données erronées et la contrainte de forme imposée dans l’inférence bayésienne. Ce compromis permet de rétablir la forme naturelle des courbes de pH malgré la présence d’une erreur sur certaines mesures. Le mode a posteriori reste collé à la vraie courbe et ne s’écarte que lorsqu’il rencontre des mesures erronées.



(a) La base B-spline (5 nœuds intérieurs) (b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle

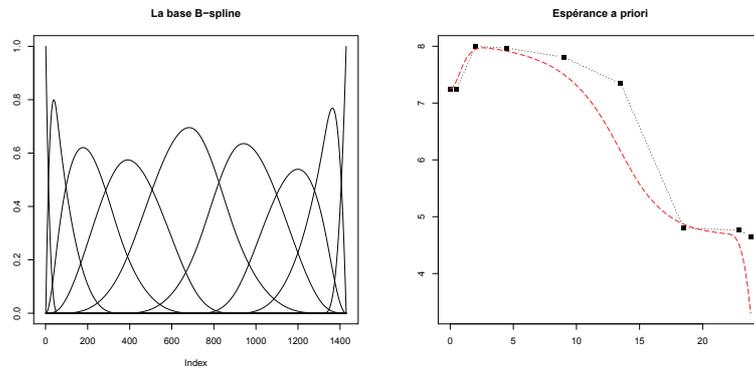


(c) *Espérance a posteriori* avec prior non informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$ (d) *Espérance a posteriori* avec prior non informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim NIG$

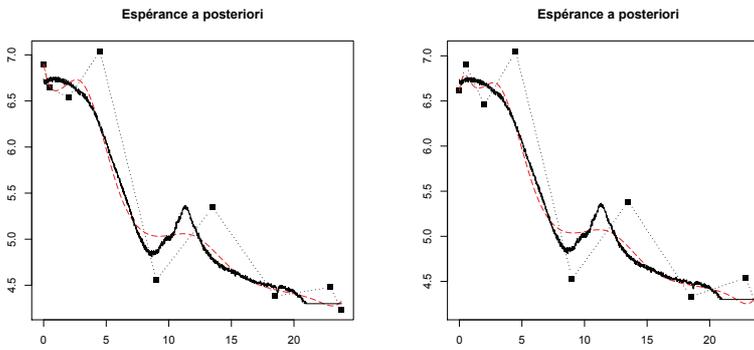


(e) *Mode a posteriori* et le polygone de contrôle (f) *Mode a posteriori corrigé* et le polygone de contrôle

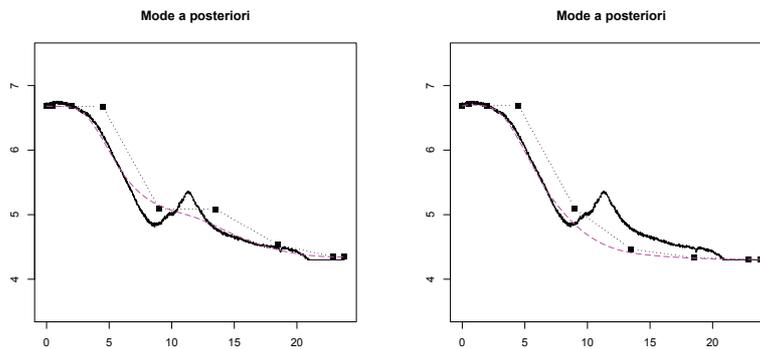
Figure 3.8 – Application de la méthode bayésienne pour la reconstruction de la courbe de diminution de pH (Modalité O₂).



(a) La base B-spline (5 nœuds intérieurs) (b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle

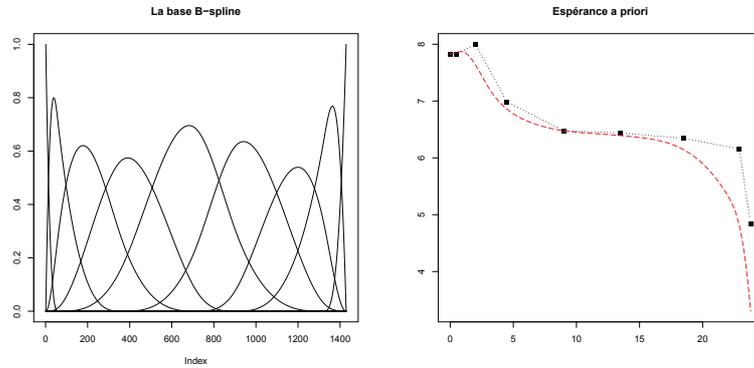


(c) Espérance a posteriori (d) Espérance a posteriori avec prior non informatif sans prior informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$ $(\beta, \sigma^2) \sim NIG$

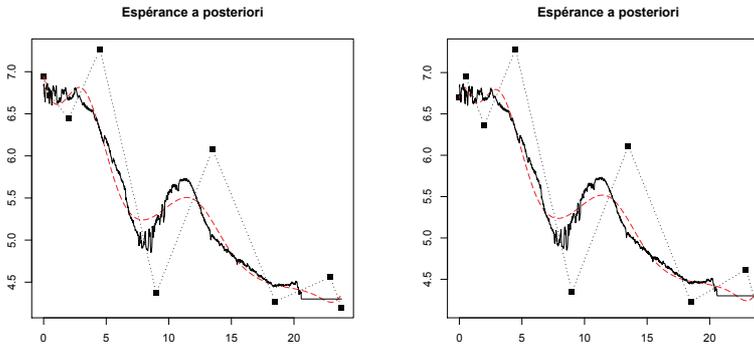


(e) Mode a posteriori et le polygone de contrôle (f) Mode a posteriori corrigé et le polygone de contrôle

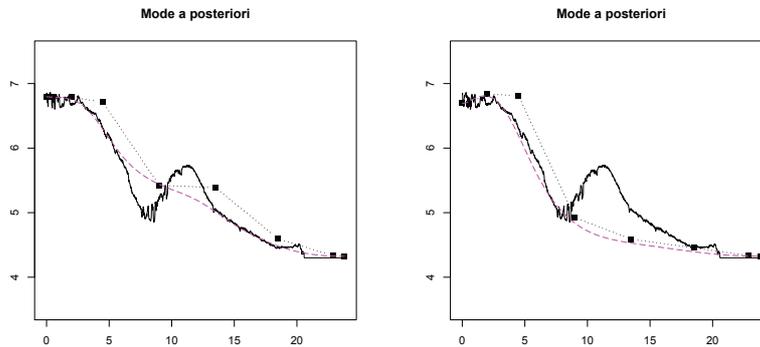
Figure 3.9 – Application de la méthode bayésienne pour la reconstruction de la courbe de diminution de pH (Modalité N₂).



(a) La base B -spline (5 nœuds intérieurs) (b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle

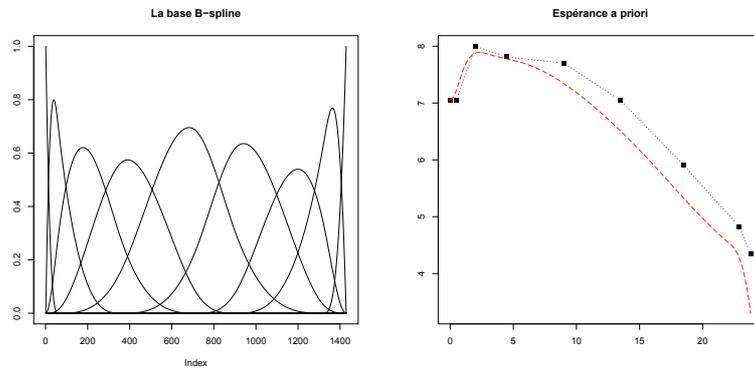


(c) *Espérance a posteriori* (d) *Espérance a posteriori* avec prior non informatif sans prior informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$ $(\beta, \sigma^2) \sim NIG$

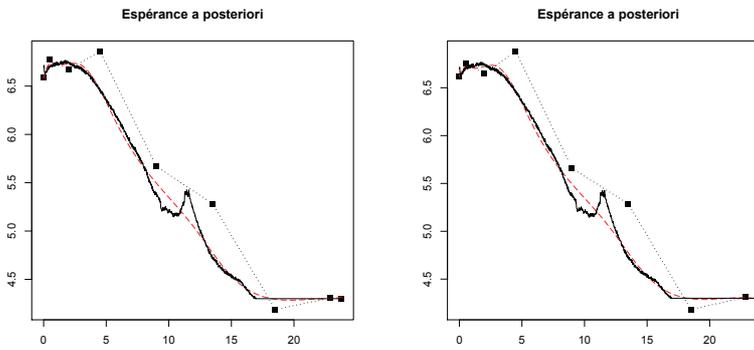


(e) *Mode a posteriori* et le polygone de contrôle (f) *Mode a posteriori corrigé* et le polygone de contrôle

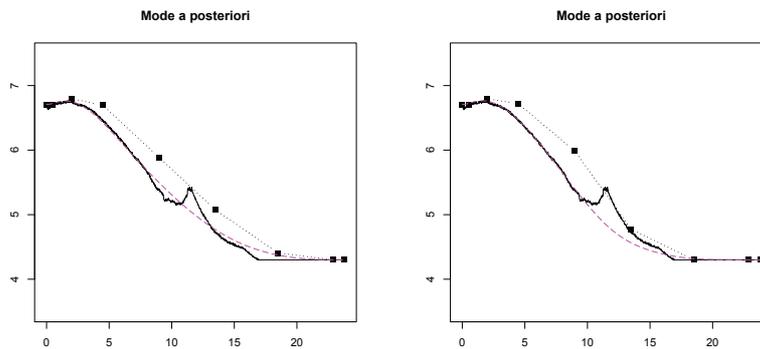
Figure 3.10 – Application de la méthode bayésienne pour la reconstruction de la courbe de diminution de pH (Modalité N_2H_2).



(a) La base B-spline (5 nœuds intérieurs) (b) Spline engendrée par $\beta^{(1)}$ et son polygone de contrôle



(c) Espérance a posteriori (d) Espérance a posteriori avec prior non informatif sans prior informatif sans contraintes : $(\beta, \sigma^2) \sim 1/\sigma^2$ $(\beta, \sigma^2) \sim NIG$



(e) Mode a posteriori et le polygone de contrôle (f) Mode a posteriori corrigé et le polygone de contrôle

Figure 3.11 – Application de la méthode bayésienne pour la reconstruction de la courbe de diminution de pH (Modalité O_2H_2).

Pour remédier au problème de la déformation des courbes de pH, on propose une alternative qui consiste à faire extraire les mesures erronées et ne garder dans la base que les bonnes mesures de pH. Les mesures entre le pH qui correspond à l'instant de l'apparition des mesures fausses et le pH qui correspond à l'instant de la fin des mesures fausses seront éliminées. En utilisant la nouvelle base des données sans les mesures erronées, on obtient les nouveaux modes corrigés dans les figures 3.8(*f*), 3.9(*f*), 3.10(*f*) et 3.11(*f*). Cette solution a permis de corriger la partie de remonter de pH grâce à la prise en compte des contraintes de formes. On remarque également que pour avoir une détection automatique de l'apparition des mesures erronées, d'autres solutions sont proposées au niveau de la littérature, entre autres, la méthode de changement de régime (Holmes and Heard, 2003).

3.5 Discussion

Nous avons proposé une méthode de régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme basée sur les B-splines. Cette nouvelle méthode est caractérisée par la possibilité de contrôler la forme de l'estimateur de la fonction de régression moyennant un polygone de contrôle. Ce polygone est obtenu tout simplement à partir d'une interpolation d'un certains nombres de points de contrôle par des segments de droites. Les propriétés de ce polygone de contrôle sont données dans ce travail ce qui permet de mieux comprendre son lien avec la spline associée.

Pour réduire la complexité de l'utilisation des B-splines, on préfère avoir recours seulement à des nœuds fixes dans ce chapitre. Le problème des B-splines à nœuds variables n'a pas été évoqué. Comme il s'agit d'un contexte de régression simple, il suffit d'une simple inspection visuelle pour déterminer le bon jeu de nœuds dans l'estimation de la fonction de régression inconnue f . Wold (1974) propose quelques astuces pouvant aider à un bon choix des nœuds (Molinari, 2000).

Des contraintes de forme (monotone, unimodale, unimodale concave, ... etc) sont exprimées partant d'une information a priori sur la forme de la fonction de régression. La contrainte de régularité est facilement calibrable en fonction de l'ordre k de la spline choisie. Le mode a posteriori était choisi comme estimateur a posteriori pour la fonction de régression inconnue. Le calcul du mode a posteriori a été fait moyennant un algorithme de type recuit simulé. Pour construire les bandes de confiances de l'estimateur, des simulations suivant la loi a posteriori ont été faites moyennant un algorithme de type Metropolis-Hastings couplé à l'échantillonneur de Gibbs.

Pour tester la méthode, nous nous sommes intéressés à une large famille de courbes, comportant des formes monotone, unimodale et concave. Une application sur des données de pH concernant des courbes d'acidification a été proposée. La méthode proposée, avec les B-splines, fonctionne sur cette famille avec une erreur de reconstruction faible. Cependant, les positions et le nombre des nœuds dans la base B-splines ne sont pas variables dans l'inférence ce qui limite les performances de la méthode. Les chapitres suivants consisteront à étendre la méthode à des modèles plus généraux. Pour avancer dans cette voie, il semble qu'une étude plus poussée de la régression bayésienne sous contraintes et à nœuds variables soit nécessaire. Une étude du comportement asymptotique de l'estimateur paraît intéressante également avec une analyse numérique plus fine de l'erreur de la reconstruction des courbes pour un ou différents critères d'erreurs. (Robert and Casella, 2004)

Annexe

Etape 0 : Donner : m_k, \mathbf{y}

Etape 1 : Simuler $\beta^{(1)}$ sous contrainte de forme isotonique

$q_1 = \mathcal{U}[\min(y_1, \dots, y_n), \bar{\mathbf{y}} = 1/n \sum_{j=1}^n y_j]$
 $q_2 = \mathcal{U}[\bar{\mathbf{y}} = 1/n \sum_{j=1}^n y_j, \max(y_1, \dots, y_n)]$
 Générer $\beta_1^{(1)} \sim q_1$ et $\beta_{m_k}^{(1)} \sim q_2$

Simuler u_2, \dots, u_{m_k-1} à partir de loi uniforme $\mathcal{U}[\beta_1^{(1)}, \beta_{m_k}^{(1)}]$

Soit $U_{(2)}, \dots, U_{(m_k-1)}$ la statistique d'ordre de $\{u_2, \dots, u_{m_k-1}\}$ et on pose
 $\beta_2^{(1)} = U_{(2)}, \dots, \beta_{m_k-1}^{(1)} = U_{(m_k-1)}$

On pose $\beta^{(1)} = (\beta_1^{(1)}, \beta_2^{(1)}, \dots, \beta_{m_k}^{(1)})$

Etape 2 : Le recuit simulé

pour $t = 2, 3, \dots$ **faire**

$l \sim \{1, \dots, m_k\}$

si $l = 1$ ou $l = m_k$ **alors**

$\tilde{\beta}_{l=1}^{(t)} = \mathcal{U}[\min(y_1, \dots, y_n), \beta_2^{(t-1)}]$ ou $\tilde{\beta}_{l=m_k}^{(t)} = \mathcal{U}[\beta_{m_k-1}^{(t-1)}, \max(y_1, \dots, y_n)]$

sinon

$\tilde{\beta}_l^{(t)} = \mathcal{U}[\beta_{l-1}^{(t-1)}, \beta_{l+1}^{(t-1)}]$

fin si

$\tilde{\beta}^{(t)} = (\beta_1^{(t-1)}, \beta_2^{(t-1)}, \dots, \tilde{\beta}_l^{(t)}, \dots, \beta_{m_k}^{(t-1)})$

$\mathbf{u} = \mathcal{U}[0, 1]$

$\rho_t = \exp \left\{ - \frac{Q(\tilde{\beta}^{(t)}) - Q(\beta^{(t-1)})}{T_t} \right\} \wedge 1$

si $\mathbf{u} \leq \rho_t$ **alors**

$\beta^{(t)} = \tilde{\beta}^{(t)}$

sinon

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

fin si

Diminuer T_t en T_{t+1} .

fin pour

ALG. 3: Algorithme de simulation d'une fonction de régression inconnue f_1 sous contrainte de forme monotone.

Etape 0 : Donner : m_k, \mathbf{y}

Etape 1 : Simuler $\beta^{(1)}$ sous contrainte de forme unimodale concave.

$l \sim \{2, \dots, m_k - 1\}$ et $d = \frac{\max(y_1, \dots, y_n) - \min(y_1, \dots, y_n)}{n}$

$\beta_l^{(1)} = \mathcal{U}[\max(y_1, \dots, y_n) - d, \max(y_1, \dots, y_n) + d]$ % le mode de f_2

$f_2(a) \sim \mathcal{U}[y_1, y_l]$ et $f_2(b) \sim \mathcal{U}[y_n, y_{n-l}]$

$\beta_1^{(1)} \sim \mathcal{U}[-\beta_l^{(1)} + 2f_2(a), \beta_l^{(1)}]$ et $\beta_{m_k}^{(1)} \sim \mathcal{U}[-\beta_l^{(1)} + 2f_2(b), \beta_l^{(1)}]$

Simuler u_2, \dots, u_{l-1} à partir de loi uniforme $\mathcal{U}[\beta_1^{(1)}, \beta_l^{(1)}]$

Soit $U_{(2)}, \dots, U_{(l-1)}$ la statistique d'ordre de $\{u_2, \dots, u_{l-1}\}$

Soit $U'_{(2)}, \dots, U'_{(l)}$ la statistique d'ordre de $\{\beta_l^{(1)} - U_{(l-1)}, U_{(l-1)} - U_{(l-2)}, \dots, U_{(3)} -$

$U_{(2)}, U_{(2)} - \beta_1^{(1)}\}$ et on pose

$\beta_2^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(l)}, \beta_3^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(l)} + U'_{(l-1)}, \dots, \beta_{l-1}^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(l)} + \dots + U'_{(3)}$

Simuler v_2, \dots, v_{m_k-l-1} à partir de loi uniforme $\mathcal{U}[\beta_{m_k}^{(1)}, \beta_l^{(1)}]$

Soit $V_{(2)}, \dots, V_{(m_k-l-1)}$ la statistique d'ordre de $\{v_2, \dots, v_{m_k-l-1}\}$

Soit $V'_{(2)}, \dots, V'_{(m_k-l)}$ la statistique d'ordre de $\{\beta_l^{(1)} - V_{(m_k-l-1)}, V_{(m_k-l-1)} -$

$V_{(m_k-l-2)}, \dots, V_{(3)} - V_{(2)}, V_{(2)} - \beta_1^{(1)}\}$ et on pose

$\beta_{l+1}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(2)}, \beta_{l+2}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(2)} - V'_{(3)}, \dots, \beta_{m_k-1}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(2)} - \dots - V'_{(m_k-l-1)}$

$\beta^{(1)} = (\beta_1^{(1)}, \beta_2^{(1)}, \dots, \beta_l^{(1)}, \dots, \beta_{m_k}^{(1)})'$

Etape 2 : Le recuit simulé

pour $t = 2, 3, \dots$ **faire**

$l' \sim \{1, \dots, m_k\}$

si $l' = 1$ ou $l' = m_k$ **alors**

$\tilde{\beta}_{l'=1}^{(t)} = \mathcal{U}[-\beta_2^{(t-1)} + 2\beta_1^{(t-1)}, \beta_2^{(t-1)}]$ ou $\tilde{\beta}_{l'=m_k}^{(t)} = \mathcal{U}[-\beta_{m_k-1}^{(t-1)} + 2\beta_{m_k}^{(t-1)}, \beta_{m_k-1}^{(t-1)}]$

sinon

$\tilde{\beta}_{l'}^{(t)} = \mathcal{U}[-\max(\beta_{l'-1}^{(t-1)}, \beta_{l'+1}^{(t-1)}) + 2\beta_{l'}^{(t-1)}, \max(\beta_{l'-1}^{(t-1)}, \beta_{l'+1}^{(t-1)})]$

fin si

$\tilde{\beta}^{(t)} = (\beta_1^{(t-1)}, \beta_2^{(t-1)}, \dots, \tilde{\beta}_{l'}^{(t)}, \dots, \beta_{m_k}^{(t-1)})$

$\mathbf{u} = \mathcal{U}[0, 1]$ et $\rho_t = \exp\left\{-\frac{Q(\tilde{\beta}^{(t)}) - Q(\beta^{(t-1)})}{T_t}\right\} \wedge 1$

si $\mathbf{u} \leq \rho_t$ **alors**

$\beta^{(t)} = \tilde{\beta}^{(t)}$

sinon

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

fin si

Diminuer T_t en T_{t+1} .

fin pour

Etape 0 : Donner : m_k, \mathbf{y}

Etape 1 : Simuler $\beta^{(1)}$ sous contrainte de forme unimodale.

$l \sim \{2, \dots, m_k - 1\}$ et $d = \frac{\max(y_1, \dots, y_n) - \min(y_1, \dots, y_n)}{n}$

$\beta_l^{(1)} = \mathcal{U}[\max(y_1, \dots, y_n) - d, \max(y_1, \dots, y_n) + d]$ % le mode de f_3

$\beta_1^{(1)} \sim \mathcal{U}[y_1, y_l]$ et $\beta_{m_k}^{(1)} \sim \mathcal{U}[y_n, y_{n-l}]$

Simuler u_2, \dots, u_{l-1} à partir de loi uniforme $\mathcal{U}[\beta_1^{(1)}, \beta_l^{(1)}]$

Soit $U_{(2)}, \dots, U_{(l-1)}$ la statistique d'ordre de $\{u_2, \dots, u_{l-1}\}$

Soit $U'_{(2)}, \dots, U'_{(l)}$ la statistique d'ordre de $\{\beta_l^{(1)} - U_{(l-1)}, U_{(l-1)} - U_{(l-2)}, \dots, U_{(3)} -$

$U_{(2)}, U_{(2)} - \beta_1^{(1)}\}$ et on pose

$\beta_2^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(2)}, \beta_3^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(2)} + U'_{(3)}, \dots, \beta_{l-1}^{(1)} = \beta_1^{(1)} + U'_{(2)} + \dots + U'_{(l-1)}$

Simuler v_2, \dots, v_{m_k-l-1} à partir de loi uniforme $\mathcal{U}[\beta_{m_k}^{(1)}, \beta_l^{(1)}]$

Soit $V_{(2)}, \dots, V_{(m_k-l-1)}$ la statistique d'ordre de $\{v_2, \dots, v_{m_k-l-1}\}$

Soit $V'_{(2)}, \dots, V'_{(m_k-l)}$ la statistique d'ordre de $\{\beta_l^{(1)} - V_{(m_k-l-1)}, V_{(m_k-l-1)} -$

$V_{(m_k-l-2)}, \dots, V_{(3)} - V_{(2)}, V_{(2)} - \beta_1^{(1)}\}$ et on pose

$\beta_{l+1}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(m_k-l)}, \beta_{l+2}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(m_k-l)} - V'_{(m_k-l-1)}, \dots, \beta_{m_k-1}^{(1)} = \beta_l^{(1)} - V'_{(m_k-l)} -$

$\dots - V'_{(3)}$

$\beta^{(1)} = (\beta_1^{(1)}, \beta_2^{(1)}, \dots, \beta_l^{(1)}, \dots, \beta_{m_k}^{(1)})$

Etape 2 : Le recuit simulé

pour $t = 2, 3, \dots$ **faire**

$l' \sim \{1, \dots, m_k\}$

si $l' = 1$ ou $l' = m_k$ **alors**

$\tilde{\beta}_{l'=1}^{(t)} = \mathcal{U}[\min(y_1, \dots, y_l), \beta_1^{(t-1)}]$ ou $\tilde{\beta}_{l'=m_k}^{(t)} = \mathcal{U}[\min(y_{n-l}, \dots, y_n), \beta_{m_k}^{(t-1)}]$

sinon

$\tilde{\beta}_{l'}^{(t)} = \mathcal{U}[\min(\beta_{l'+1}^{(t-1)}, \beta_{l'-1}^{(t-1)}), \max(\beta_{l'+1}^{(t-1)}, \beta_{l'-1}^{(t-1)})]$

fin si

$\tilde{\beta}^{(t)} = (\tilde{\beta}_1^{(t-1)}, \beta_2^{(t-1)}, \dots, \tilde{\beta}_{l'}^{(t)}, \dots, \beta_{m_k}^{(t-1)})$

$\mathbf{u} = \mathcal{U}[0, 1]$ et $\rho_t = \exp \left\{ - \frac{Q(\tilde{\beta}^{(t)}) - Q(\beta^{(t-1)})}{T_t} \right\} \wedge 1$

si $\mathbf{u} \leq \rho_t$ **alors**

$\beta^{(t)} = \tilde{\beta}^{(t)}$

sinon

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

fin si

Diminuer T_t en T_{t+1} .

fin pour

ALG. 5: Algorithme de simulation de f_3 sous contrainte de forme unimodale.

4

Régression bayésienne avec B-splines à nœuds variables

Résumé : On présente une méthode de régression bayésienne avec B-splines à nœuds variables. Pour estimer le nombre et la position des nœuds, nous intégrons la loi a posteriori par rapport aux coefficients de régression et la variance et nous proposons des simulations grâce à un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. La configuration des nœuds est modifiée grâce à une heuristique qui restreint les modifications aux régions où la courbe change rapidement. L'inférence des coefficients de régression est proposée en absence et en présence de contraintes de forme. La probabilité d'acceptation/rejet de l'algorithme de simulation à sauts réversibles est définie par le produit de trois termes de ratio de probabilités et un terme Jacobien. On détaille dans ce chapitre le calcul des ratio de vraisemblance, des priors, de proposition et le terme Jacobien. On montre également qu'en présence de contraintes de forme le rapport de vraisemblance peut être approximé avec une erreur de $O(n^{-1/2})$.

4.1 Introduction

Le choix des nœuds dans l'utilisation des B-splines est un sujet incontournable. Deux approches sont envisageables pour choisir le nombre et la position des nœuds dans un

modèle de régression avec les B-splines. Une première façon de choisir les nœuds consiste à considérer des nœuds fixes (un certain nombre de nœuds arbitrairement choisis). La deuxième façon de régler ce paramètre consiste à prendre des nœuds variables et à ce moment les nœuds deviennent un paramètre à estimer dans l'inférence. Cette seconde approche paraît très pertinente et a été l'objet d'étude, surtout en statistique bayésienne, dans plusieurs travaux (Denison et al., 1998; DiMatteo et al., 2001; Zhou and Shen, 2001; Hansen and Kooperberg, 2002; Kyung, 2011). Denison et al. (1998) ont proposé une approche quasi-bayésienne avec des nœuds variables dans une base de splines à puissances tronquées afin de construire une méthode automatique d'ajustement des courbes. Dans les méthodes de Denison et al. (1998) et DiMatteo et al. (2001), des simulations suivant la loi a posteriori ont été faites par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles (RJCMC) introduit par Green (1995).

Le problème des nœuds variables nécessite une étude approfondie où la variabilité des nœuds est en deux dimensions : en nombre et en positions. L'objectif est d'estimer la fonction de régression inconnue f . On suppose que les données $(x_i, y_i)_{i=1}^n$ sont indépendantes, tels que $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ et $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$, et qu'elles satisfont le modèle usuel :

$$y_i | x_1, \dots, x_n \sim p(y_i | f(x_i), \sigma) \quad i = 1, \dots, n,$$

où $p(y_i | \theta, \sigma)$ est une distribution normale $\mathcal{N}(\theta, \sigma^2)$, f est une fonction à valeurs réelles définie sur un intervalle $[a, b] \subset \mathbb{R}$ et σ est introduit comme un paramètre de dispersion dans le modèle. On cherche à estimer la fonction f par une régression bayésienne avec B-splines en supposant que f appartient à une classe de fonctions de dimension finie. En particulier, la fonction f sera modélisée par une spline cubique (en fixant l'ordre k des B-splines à 4) sur l'intervalle $[a, b]$. La classe des splines cubiques est assez large et sert à l'approximation de n'importe quelle fonction localement lisse (DiMatteo et al., 2001).

Dans ce chapitre, nous proposons un nouveau schéma de simulation pour la régression bayésienne avec B-splines à nœuds variables. Dans la mesure où la dimension des nœuds qui engendrent les bases de B-spline est variable, l'espace des paramètres pour estimer f est une union disjointe d'espaces de splines. Des lois a priori seront initialement spécifiées sur les paramètres inconnus du modèle. La distribution a posteriori des paramètres qui en résulte couvre une large classe de modèles de prédiction. Nous étudions au même temps la régression en absence et en présence de contraintes de forme en considérant la stratégie de DiMatteo et al. (2001) qui consiste à intégrer la loi a posteriori par rapport aux coefficients de la régression et la variance. Les nœuds seront simulés suivant leur

loi a posteriori par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles alors que les coefficients et la variance seront simulés autrement. En absence de contraintes de forme, nous proposons de générer les coefficients et la variance par deux étapes de Gibbs en utilisant leurs densités conditionnelles a posteriori. En présence de contraintes de forme, le problème qu'on rencontre à ce niveau réside essentiellement dans la difficulté de générer des simulations suivant la distribution tronquée des coefficients qui peut changer de dimension dans l'inférence. Pour proposer une solution à ce problème, nous montrons comment le fait d'introduire des contraintes de forme permet d'obtenir une approximation du rapport de vraisemblance sous contraintes avec une erreur de $O(n^{-1/2})$ et nous utilisons les nœuds simulés après chaque étape de RJMCMC pour calculer une nouvelle base de B-spline et des coefficients sans contrainte par moindres carrés. Ces coefficients qui ne vérifient pas la contrainte seront projetés sur l'espace sous contrainte par un opérateur de projection. Cette projection peut être obtenue par un algorithme de type recuit simulé dont l'étape de proposition garantit la vérification des contraintes de forme. D'une manière précise, le but se résume à proposer un schéma de simulation pour la régression bayésienne sans et sous contraintes de forme en recherchant un compromis entre la parcimonie et la flexibilité de la régression aux nœuds variables. Les résultats numériques de cette nouvelle approche ont présenté une amélioration des performances prédictives par rapport à d'autres méthodes citées souvent en littérature.

Dans la première partie, seront présentés les détails de la spécification des lois a priori sur les paramètres du modèle et le calcul du ratio de vraisemblance. La deuxième partie détaillera l'inférence bayésienne sur les coefficients de régression et la variance du modèle. En particulier, on propose d'élargir la méthode au cas où des contraintes de forme sont considérées dans l'inférence des coefficients de régression après chaque insertion ou suppression d'un nœud. Les simulations suivant la loi a posteriori pour les positions et le nombre des nœuds seront explicitées en détails. Finalement, des possibilités d'extension de la méthode seront discutées en dernière partie.

4.2 Le modèle de régression bayésienne

La régression est l'une des techniques les plus sollicitée en statistique appliquée au niveau du cadre fréquentiste et bayésien. Pour décrire le modèle de régression, on se donne un vecteur de réponse \mathbf{y} et une variable explicative \mathbf{x} . Le problème est d'estimer la relation entre \mathbf{x} et \mathbf{y} qui peut servir, entres autres, à la prédiction d'autres réponses ne figurant pas

dans les données de construction $\{x_i\}_{i=1}^n$ et $\{y_i\}_{i=1}^n$. Le modèle usuel pour ces observations univariées est de la forme

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.1)$$

où les $\varepsilon_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ sont considérés comme les erreurs aléatoires et $\sigma > 0$ est un paramètre de dispersion inconnu. Pour un couple $(x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, la fonction $f(x)$ est l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(y|x)$ utilisée généralement dans les prédictions. Pour l'estimer, il existe des techniques paramétriques et non paramétriques. Parmi ces techniques, citons par exemple, les méthodes de projection discutées dans Mammen (1991), les polynômes locaux étudiées dans Fan and Gijbels (1995), les splines de lissage et les méthodes à noyaux (Schimek, 2000). Nous préférons ici estimer f par les B-splines pour les raisons discutées dans les chapitres précédents. On note par le couple (κ, \mathbf{t}) la configuration des nœuds dans la base B-spline tels que κ est le nombre des nœuds et $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_\kappa)'$ est le vecteur nodal qui représente les positions des nœuds. Pour $a < t_1 \leq \dots \leq t_\kappa < b$, on note également par $B_{\mathbf{t},k}$ la base de B-spline et par $B_{j,k}$ une fonction B-spline (où $j = 1, \dots, \kappa + k$ et k est l'ordre de la base). On rappelle au passage que le cardinal des fonctions B-spline $B_{j,k}$ vaut $\kappa + k$ car $2k$ nœuds supplémentaires sont à rajouter aux nœuds intérieurs \mathbf{t} pour construire la base B-spline. Dans tout le chapitre, on fixe l'ordre k à 4 et on suppose que la fonction de régression inconnue f peut être modélisée par une spline cubique engendrée par la base B-spline $B_{\mathbf{t},k}$. Sous ces considérations, on peut exprimer, pour tout $x \in [a, b]$, la fonction de régression f sous la forme de la combinaison linéaire suivante :

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\kappa+4} B_{j,k}(x)\beta_j, \quad (4.2)$$

où $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_{\kappa+4})'$ est le vecteur des coefficients de régression. Le nombre κ et la position des nœuds \mathbf{t} sont des paramètres à estimer avec la variance σ^2 et les coefficients β . L'inférence consiste alors à supposer que la "vraie" fonction de régression est inconnue mais elle appartient à une classe de fonctions f_1, f_2, \dots où f_κ désigne une fonction de régression estimée avec exactement κ nœuds.

4.2.1 Le modèle hiérarchique complet

L'espace des paramètres Θ peut s'écrire comme une réunion dénombrable de sous-espaces $\Theta = \cup_{\kappa=1}^{\infty} (\{\kappa\} \times \Theta_\kappa)$. On précise au passage que Θ_κ est un sous-espace de l'espace

euclidien $\mathbb{R}^{\kappa+4} \times [a, b]^\kappa \times [0, \infty)$ où $(\kappa + 4)$ désigne la dimension de l'espace des coefficients correspondant à la fonction de régression f_κ . On désigne par $\theta^{(\kappa)}$ un élément générique de Θ_κ tel que $\theta^{(\kappa)} = (\beta_1, \dots, \beta_{\kappa+4}, t_1, \dots, t_\kappa, \sigma^2)'$. En considérant les données $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^n$, on peut écrire le modèle hiérarchique :

$$p(\kappa, \theta^{(\kappa)}, \mathbf{y}) = \pi_\kappa(\kappa) \pi_\theta(\theta^{(\kappa)} | \kappa) p(\mathbf{y} | \kappa, \theta^{(\kappa)}), \quad (4.3)$$

où p est une notation générique pour désigner une densité quelconque. Le modèle (4.3) représente un produit de probabilité des lois a priori des paramètres et de la vraisemblance. Les simulations des paramètres κ et $\theta^{(\kappa)}$ seront réalisées à partir de la distribution a posteriori $p(\kappa, \theta^{(\kappa)} | \mathbf{y})$ qui représente en inférence bayésienne la distribution cible. Ainsi, en utilisant le modèle hiérarchique bayésien complet (4.3), la densité jointe a posteriori, par rapport à la mesure de Lebesgue pour le paramètre $\theta^{(\kappa)}$ et la mesure de comptage pour le paramètre κ , des paramètres sachant les données s'écrit :

$$p(\kappa, \theta^{(\kappa)} | \mathbf{y}) = \frac{\pi_\kappa(\kappa) \pi_\theta(\theta^{(\kappa)} | \kappa) p(\mathbf{y} | \kappa, \theta^{(\kappa)})}{\sum_{\kappa=0}^{\infty} \pi_\kappa(\kappa) \left\{ \int_{\Theta_\kappa} \pi_\theta(\theta^{(\kappa)} | \kappa) p(\mathbf{y} | \kappa, \theta^{(\kappa)}) d\theta^{(\kappa)} \right\}}. \quad (4.4)$$

Pour simuler suivant la loi a posteriori $p(\kappa, \theta^{(\kappa)} | \mathbf{y})$ lorsque κ est variable, le recours à une méthode de Monte Carlo par Chaîne de Markov adaptée à ce genre de simulation s'avère nécessaire. On propose de considérer la stratégie de DiMatteo et al. (2001) qui consiste à découpler les simulations de (\mathbf{t}, κ) et (β, σ^2) . Nous simulons (\mathbf{t}, κ) par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Cet algorithme, dont la théorie est détaillée dans l'article de Green (1995), permet le changement de dimension κ pendant les simulations. Les sauts dans l'algorithme permettent les transitions entre les différentes dimensions et positions de nœuds visitées dans la chaîne. Au final, les paramètres (\mathbf{t}, κ) seront estimés par l'espérance a posteriori.

4.2.2 La spécification des priors

Nous proposons la spécification des lois a priori sur les paramètres inconnus dans le modèle (4.1) où f est donnée par (4.2). L'élément crucial dans le calcul de la base de B-spline $B_{\mathbf{t},k}$ est le vecteur nodal \mathbf{t} . Comme choix pour la loi a priori sur les positions des nœuds, en l'absence d'une information précise, nous considérons la distribution suivante

$$\pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) = \frac{\kappa!}{(b-a)^\kappa}.$$

Pour modifier les nœuds dans les simulations, les transitions seront données par une heuristique de position des nœuds semblable à celle proposée dans l'article de Zhou and Shen (2001). L'idée de cette distribution consiste à insérer plus de nœuds dans les régions où la courbe change rapidement. Plus précisément, selon cette heuristique, on insère un nouveau nœud avec une forte probabilité dans la région où des nœuds ont été insérés dans les itérations récentes. À partir de la séquence nodale $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_\kappa)'$, on choisit uniformément un nœud $t_{i_*} \sim \mathcal{U}_{\{t_1, \dots, t_\kappa\}}$. Pour générer le nœud à insérer \bar{t} , on considère une distribution φ et le nœud à insérer \bar{t} est généré par la distribution φ centrée en t_{i_*} ($\bar{t} \sim \varphi(\cdot | t_{i_*})$). Plus de détails sur la distribution φ de ce noyau de proposition qui tient compte de l'heuristique de position des nœuds seront donnés plus tard.

Remarque 4.2.1 *On pourra spécifier éventuellement un prior de distribution discrète sur la position des nœuds. Par exemple, Denison et al. (2002) ont proposé la loi suivante :*

$$\pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}|\kappa) = \binom{T}{\kappa}^{-1} \frac{1}{\kappa_{\max} + 1}. \quad (4.5)$$

Cette loi a priori pour \mathbf{t} est vague mais propre où on supposera que $\kappa = 1, 2, \dots, \kappa_{\max}$ ce qui assure que chaque valeur de κ à la même probabilité d'être choisie que la valeur maximale κ_{\max} . La valeur κ_{\max} doit être choisie suffisamment grande pour que son effet soit négligeable sur la loi a posteriori. Le terme T dans (4.5) désigne le cardinal de la collection des positions candidates présélectionnées pour les nœuds à insérer. Il est clair que toutes les collections $\{t_1, \dots, t_\kappa | \kappa = 1, \dots, \kappa_{\max}\}$ sont équiprobables. L'avantage de considérer ce type de prior, réside dans le fait qu'il ne pénalise pas explicitement aucune valeur de la dimension $((\kappa + k) \times n)$ de la base lorsque κ varie.

Pour le choix du prior π_κ sur le paramètre κ , on peut adopter une loi de Poisson tronquée de densité \mathcal{P} ou bien une loi Uniforme sur l'ensemble $\{1, \dots, \kappa_{\max}\}$. En pratique, les résultats ne sont pas très sensibles à la spécification de la loi a priori π_κ . On supposera alors que $\kappa|\lambda \sim \mathcal{P}(\lambda)$ tel que $\pi_\kappa(\kappa) \propto \frac{e^{-\lambda} \lambda^\kappa}{\kappa!} \mathbf{1}_{\{1, \dots, \kappa_{\max}\}}$ où λ est le paramètre de la distribution de Poisson tronquée. On discutera le paramètre λ et le choix judicieux de κ_{\max} plus tard dans les simulations. Avec une distribution de Poisson tronquée, la loi a priori π_κ se comporte bien pour une estimation parcimonieuse dans la mesure où elle ne favorise pas une dimension élevée de la base B-spline. Pour les coefficients de régression β , on spécifie le "g-prior" de Zellner (1986) comme loi a priori de densité π_β . Cette spécification particulière introduit une structure de variance-covariance a priori entre

les coefficients β . Le g-prior associé à β est une distribution Normale donnée par : g-prior = $\mathcal{N}_{\kappa+4}(m, c\sigma^2(B'_{\mathbf{t},k}B_{\mathbf{t},k})^{-1})$. Ce prior a été largement discuté dans Ibrahim and Chen (2000). Le choix de ce prior est essentiellement pour ses propriétés importantes. En particulier, deux fonctions proches $B_{j,k}$ et $B_{j',k}$ correspondent à deux coefficients β_j et $\beta_{j'}$ a priori très corrélés. On remarque que si les deux fonctions $B_{j,k}$ et $B_{j',k}$ sont proches, alors :

$$r_{jj'} = \frac{\int_{[a,b]} B_{j,k}(x)B_{j',k}(x)dx}{\left(\int_{[a,b]} B_{j,k}^2(x)dx \int_{[a,b]} B_{j',k}^2(x)dx\right)^{1/2}} \approx 1. \quad (4.6)$$

On peut montrer que la corrélation a priori entre les coefficients diminue avec $r_{jj'}$. Dans le cas limite $r_{jj'} = 0$ (les fonctions $B_{j,k}$ et $B_{j',k}$ sont orthogonales), les coefficients β_j et $\beta_{j'}$ sont indépendants. En absence d'information précise (par exemple lorsque on a aucune connaissance sur les signes des coefficients), on fixe une espérance a priori égale à zéro ($m = (0, \dots, 0)'$) pour $\beta_1, \dots, \beta_{\kappa+4}$. Pour la constante c , plusieurs auteurs dans la littérature (Gustafon, 2000; Smith and Kohn, 1996) ont proposé $c = n$. En utilisant la taille des données, le g-prior précédemment spécifié avec $c = n$ est nommé l'information-unité a priori par Kass and Wasserman (1996). Selon ces considérations, le prior pour les coefficients de régression est alors :

$$\pi_{\beta}(\beta|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2) = \mathcal{N}_{\kappa+4}\left(0, \sigma^2 n(B'_{\mathbf{t},k}B_{\mathbf{t},k})^{-1}\right). \quad (4.7)$$

On précise que la densité complète conditionnelle a posteriori des coefficients de régression est donnée par $p(\beta|\sigma^2, \mathbf{t}, \kappa, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathcal{N}_{\kappa+4}\left(\frac{n}{1+n}\hat{\beta}, \frac{n}{1+n}\sigma^2(B'_{\mathbf{t},k}B_{\mathbf{t},k})^{-1}\right)$, où $\hat{\beta}$ est l'estimateur de moindres carrés classiques des coefficients de régression. Alors, l'espérance a posteriori ressemble à l'estimateur des moindres carrés et devient égale à ce dernier quand $n \rightarrow \infty$ (Denison et al., 2002). Concernant la variance de régression (σ^2), on adopte un prior de distribution inverse-gamma de densité $\pi_{\sigma^2}(\sigma^2) = \mathcal{IG}(\tau_1, \tau_2)$ où $\tau_1, \tau_2 > 0$. Pour ce prior, dont le mode de sa densité est situé à $\tau_2/(\tau_1 + 1)$, on pose $\tau_1 = \tau_2 = 0.01$. On évite d'affecter la valeur zéro à τ_1 et τ_2 pour ne pas avoir un prior impropre et on évite les grandes valeurs aussi pour réduire la sensibilité de l'inférence a posteriori à τ_1 et τ_2 .

4.3 La régression bayésienne sans contraintes

Dans la section précédente, on a présenté le choix du prior sur les paramètres inconnus dans le modèle usuel (4.1). Ce prior se décompose de la manière suivante :

$$\pi(\beta, \kappa, \mathbf{t}, \sigma^2) = \pi_{\beta}(\beta|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2)\pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}|\kappa)\pi_{\kappa}(\kappa)\pi_{\sigma^2}(\sigma^2), \quad (4.8)$$

où π est une notation de la densité jointe du prior sur l'ensemble des paramètres inconnus. D'après le choix des lois a priori discuté précédemment, on pourra calculer analytiquement la vraisemblance intégrée des données sachant le nombre et les positions des nœuds. Nous allons voir dans la suite, que l'intégration par rapport à β et σ^2 va servir pour simuler uniquement suivant la loi marginale a posteriori $p(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{y})$:

$$p(\mathbf{y} | \kappa, \mathbf{t}) = \int \int p(\mathbf{y} | \kappa, \mathbf{t}, \beta, \sigma^2) \pi_\beta(\beta | \mathbf{t}, \kappa, \sigma^2) \pi_{\sigma^2}(\sigma^2) d\beta d\sigma^2. \quad (4.9)$$

La méthodologie qu'on propose dans ce chapitre consiste à simplifier l'inférence a posteriori en considérant dans la chaîne de simulation seulement les deux paramètres κ et \mathbf{t} . Cela permet de réduire la complexité des simulations et de diminuer la dimension des paramètres à estimer de $(2\kappa + 6)$ à seulement $(\kappa + 1)$.

4.3.1 Le calcul du ratio de vraisemblance

Posons $K = \kappa + 4$ et $V = n(B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1}$. Alors, pour $\beta \in \mathcal{X}_K \subset \mathbb{R}^K$, la vraisemblance (4.9) est donnée explicitement par :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y} | \kappa, \mathbf{t}) &= \int_{\mathcal{X}_K} \int_0^\infty \left[(2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\beta)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\beta)}{2\sigma^2} \right\} (2\pi\sigma^2)^{-\frac{K}{2}} |V|^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. \exp \left\{ -\frac{\beta'(V)^{-1}\beta}{(2\sigma^2)} \right\} \frac{\tau_2^{\tau_1}}{\Gamma(\tau_1)} (\sigma^2)^{-(\tau_1+1)} \exp \left\{ -\frac{\tau_2}{\sigma^2} \right\} \right] d\beta d\sigma^2 \\ &= \frac{\tau_2^{\tau_1} \Gamma(\tau_1^*) (\tau_1^*)^{K/2} \left| \frac{\tau_2^* V^*}{\tau_1^*} \right|^{1/2}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \Gamma(\tau_1) |V|^{1/2} (\tau_2^*)^{(2\tau_1^*+K)/2}}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

où $\Gamma(\cdot)$ représente la fonction Gamma et :

$$\begin{aligned} m^* &= (V^{-1} + B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1} (B'_{\mathbf{t},k} \mathbf{y}) = \left\{ (n(B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1})^{-1} + B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k} \right\}^{-1} (B'_{\mathbf{t},k} \mathbf{y}) = \frac{n}{1+n} \hat{\beta}; \\ V^* &= (V^{-1} + B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1} = \left\{ (n(B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1})^{-1} + B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k} \right\}^{-1} = \frac{n}{1+n} (B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})^{-1}; \\ \tau_1^* &= \tau_1 + n/2; \\ \tau_2^* &= \tau_2 + \{ \mathbf{y}' \mathbf{y} - (m^*)' (V^*)^{-1} m^* \} / 2. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Nous obtenons (4.10) suivant le calcul bayésien standard à partir des priors conjugués.

Il est facile à ce moment de calculer le rapport de vraisemblance nécessaire pour les simulations avec un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Ce rapport

de vraisemblance sera utilisé dans le calcul de la probabilité d'acceptation/rejet. On note par (\mathbf{t}, κ) un état actuel quelconque dans les transitions et par (\mathbf{t}^c, κ^c) un état candidat. Par exemple, il existe un type de transition dans la chaîne de simulation qui consiste à insérer un nœud dans le vecteur \mathbf{t} . Pour ce type de transition d'un état courant (\mathbf{t}, κ) à un état candidat $(\mathbf{t}^c, \kappa^c = \kappa + 1)$, on associe le rapport de vraisemblance donné par :

$$\frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{t}^c, \kappa^c)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{t}, \kappa)} = (\tau_1^*)^{1/2} \frac{(\tau_2^*)^{(2\tau_1^*+K)/2}}{(\tau_2^{*c})^{(2\tau_1^*+K+1)/2}} \frac{|V^{*c}|^{1/2}}{|V^*|^{1/2}} \frac{|V|^{1/2}}{|V^c|^{1/2}} = (\tau_1^*)^{1/2} \frac{(\tau_2^*)^{(2\tau_1^*+K)/2}}{(\tau_2^{*c})^{(2\tau_1^*+K+1)/2}}, \quad (4.12)$$

où τ_2^{*c} est obtenu en utilisant le couple $(\mathbf{t}^c, \kappa^c = \kappa + 1)$ dans (4.11). On note la simplification au niveau du rapport $|V^{*c}|^{1/2}|V|^{1/2}/|V^*|^{1/2}|V^c|^{1/2} = 1$ grâce au g-prior (4.7). En utilisant (4.12) et (4.11), le rapport de vraisemblance (4.12) peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{t}^c, \kappa^c)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{t}, \kappa)} &= (\tau_1 + n/2)^{1/2} \frac{\left(\tau_2 + \{\mathbf{y}'\mathbf{y} - (m^*)'(V^*)^{-1}m^*\}/2\right)^{(2\tau_1^*+K)/2}}{\left(\tau_2 + \{\mathbf{y}'\mathbf{y} - (m^{*c})'(V^{*c})^{-1}m^{*c}\}/2\right)^{(2\tau_1^*+K^c)/2}} \quad (4.13) \\ &= (\tau_1 + n/2)^{1/2} \frac{\left(\tau_2 + \mathbf{y}'\{\mathbf{I}_n - n(n+1)^{-1}B_{\mathbf{t},k}(B'_{\mathbf{t},k}B_{\mathbf{t},k})^{-1}B'_{\mathbf{t},k}\}\mathbf{y}/2\right)^{(2(\tau_1+n/2)+K)/2}}{\left(\tau_2 + \mathbf{y}'\{\mathbf{I}_n - n(n+1)^{-1}B_{\mathbf{t}^c,k}(B'_{\mathbf{t}^c,k}B_{\mathbf{t}^c,k})^{-1}B'_{\mathbf{t}^c,k}\}\mathbf{y}/2\right)^{(2(\tau_1+n/2)+K^c)/2}} \\ &\approx (n)^{1/2} \frac{\left((\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\beta})'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\beta})\right)^{(n+K)/2}}{\left((\mathbf{y} - B_{\mathbf{t}^c,k}\widehat{\beta}^c)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t}^c,k}\widehat{\beta}^c)\right)^{(n+K+1)/2}}, \quad (4.14) \end{aligned}$$

où $\widehat{\beta}$ est l'estimateur du moindré carré des coefficients de régression. On remarque au passage que ce rapport de vraisemblance $p(\mathbf{y}|\mathbf{t}^c, \kappa^c)/p(\mathbf{y}|\mathbf{t}, \kappa)$ donné par (4.13) tient compte d'un facteur de dimension très important égale à $(\tau_1^*)^{1/2} = \sqrt{(\tau_1 + n/2)}$. Ce facteur sert dans le rapport de vraisemblance à donner de l'importance à n quand la taille des données devient grande. On remarque également que ce rapport de vraisemblance peut être approximé par (4.14) quand $n \rightarrow \infty$ ($\frac{n}{n+1} \rightarrow 1$) et que les paramètres de l'inverse gamma (τ_1 et τ_2) sont négligeables. L'avantage de la stratégie de DiMatteo et al. (2001) réside dans le fait que l'intégration par rapport à β et σ^2 permet l'obtention d'une simulation rapide en réduisant l'espace des paramètres dans la chaîne et en minimisant le coût du calcul dans le rapport de vraisemblance par l'implémentation de $\widehat{\beta}$.

On note également que l'importance de la loi a priori π_κ spécifiée précédemment pour le nombre des nœuds devient faible quand la taille des données est grande (DiMatteo et al., 2001). Denison et al. (1998) n'ont pas spécifié un prior sur les coefficients β et

ont remplacé $p(\mathbf{y}|\mathbf{t}^c, \kappa^c)/p(\mathbf{y}|\mathbf{t}, \kappa)$ par $p(\mathbf{y}|\widehat{\beta}^c, \mathbf{t}^c, \kappa^c)/p(\mathbf{y}|\widehat{\beta}, \mathbf{t}, \kappa)$. Dans leur travail, l'estimation des coefficients par plug in moindres carrés produit une chaîne de Markov où les données sont insuffisamment informatives du nombre de nœuds et l'estimateur à tendance à sur-estimer la fonction de régression (DiMatteo et al., 2001).

Évidemment, pour l'estimation de la fonction de régression f , l'inférence des coefficients β et σ^2 ne doit pas être négligée. Dans ce travail, on propose deux façons pour l'inférence des coefficients β en absence et en présence de contraintes de forme. L'idée de cette inférence sera décrite dans les paragraphes 4.3.2 et 4.4 dans la suite.

4.3.2 Schéma de simulation en absence de contraintes

D'après le modèle hiérarchique (4.3) et le prior (4.8), on peut dériver explicitement les distributions a posteriori conditionnelles des coefficients et la variance ce qui permet de découpler l'inférence bayésienne de (\mathbf{t}, κ) et (β, σ^2) . Plus précisément, nous proposons de générer les coefficients de régression et la variance σ^2 du modèle à partir de leurs lois a posteriori conditionnelles et seuls les paramètres (\mathbf{t}, κ) seront simulés par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Le schéma de simulation consiste à simuler un couple $(\mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)})$ après chaque itération l de RJMCMC et implémenter deux étapes de Gibbs pour générer deux chaînes $\beta^{(l)}$ et $(\sigma^2)^{(l)}$. En posant $\mathbf{P}_\beta^{(l)} = ((\sigma^2)^{(l)}, \mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)}, \mathbf{x}, \mathbf{y})$ et $\mathbf{P}_{\sigma^2}^{(l)} = (\beta^{(l)}, \mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)}, \mathbf{x}, \mathbf{y})$, les lois conditionnelles a posteriori sont données par

$$\begin{aligned} \beta^{(l)} | \mathbf{P}_\beta^{(l)} &\sim \mathcal{N}_{\kappa+4} \left(\frac{n}{1+n} \widehat{\beta}^{(l)}, \frac{n}{1+n} (\sigma^2)^{(l)} (B_{\mathbf{t},k}^{(l)'} B_{\mathbf{t},k}^{(l)})^{-1} \right), \\ (\sigma^2)^{(l)} | \mathbf{P}_{\sigma^2}^{(l)} &\sim \mathcal{IG} \left((\tau_1^*)^{(l)} + (\kappa^{(l)} + 4)/2, (\beta^{(l)} - (m^*)^{(l)})' \{(V^*)^{(l)}\}^{-1} (\beta^{(l)} - (m^*)^{(l)})/2 + (\tau_2^*)^{(l)} \right), \end{aligned}$$

où τ_1^* , τ_2^* , m^* et V^* sont donnés par (4.11).

Ainsi, le couple $(\mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)})$ simulé suite à chaque itération de Metropolis-Hastings à sauts réversibles sera utilisé pour générer les coefficients et la variance appropriés selon le principe de l'échantillonneur de Gibbs. Cette approche permet de simplifier les transitions où un rééquilibrage des coefficients sera proposé suite à chaque mouvement d'insertion ou de suppression d'un nœud (Genovese, 2000).

4.4 Le problème de la régression sous contraintes

L'étude de la régression bayésienne sous contraintes de forme avec B-splines à nœuds variables s'avère un problème compliqué. Plus clairement, le problème réside essentiel-

lement dans la difficulté de générer des simulations suivant la distribution tronquée des coefficients par un échantillonneur de Gibbs et par Metropolis-Hastings à sauts réversibles dont la probabilité d'acceptation/rejet nécessite le calcul d'un rapport de deux densités tronquées et qui peuvent changer de dimension dans l'inférence. Dans ce paragraphe, on s'intéresse à la présentation d'une stratégie qui permet d'estimer f en présence de contraintes de forme. Soit S l'ensemble des vecteurs $\beta^S = (\beta_j^S)_{j=1}^{k+4}$ tels que f respecte la contrainte de forme. Pour des raisons de simplicité, nous reprenons les coefficients sans contraintes β , de prior (4.7), et nous obtenons β^S par une projection de β dans l'espace sous contraintes S . En considérant une base de B-spline $B_{\mathbf{t},k}$, il existe un opérateur de projection \mathbf{P} tels que $\mathbf{P}\beta = \beta^S$ et

$$\mathbf{P}\beta = \arg \min_{\tilde{\beta} \in S} \|B_{\mathbf{t},k}\tilde{\beta} - B_{\mathbf{t},k}\beta\|^2, \quad (4.15)$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne. L'idée de l'utilisation de la projection (4.15) consiste à faire de l'inférence indirectement sur β^S en utilisant les coefficients sans contraintes β . En effet, on peut obtenir des simulations suivant le prior de β^S de la manière suivante : pour chaque valeur simulée β suivant la distribution a priori (4.7), on calcule $\beta^S = \mathbf{P}\beta$ par la résolution d'un problème d'optimisation de la forme (4.15) grâce à un algorithme de type recuit simulé dont l'étape de proposition garantie la vérification de la contrainte S .

On suppose que la matrice $\mathbf{M} = B'_{\mathbf{t},k}B_{\mathbf{t},k}$ est définie positive. Cette dernière hypothèse est vraie lorsque $K < n$.

Proposition 4.4.1 *Pour tout $\beta \in \mathbb{R}^K$, il existe un unique $\beta^S \in S$ tel que $\beta^S = \mathbf{P}\beta$. Pour tout $\zeta_1, \zeta_2 \in \mathbb{R}^K$, il existe une constante ε' telle que*

$$\|\mathbf{P}\zeta_1 - \mathbf{P}\zeta_2\| \leq \varepsilon' \|\zeta_1 - \zeta_2\|. \quad (4.16)$$

Preuve Pour démontrer l'unicité de $\beta^S \in S$, nous utilisons le théorème de projection sur un convexe fermé (Aubin, 1979). Pour chaque ν_1 et ν_2 , on définit le produit scalaire $(\nu_1, \nu_2)_{\mathbf{M}} = \nu_1' \mathbf{M} \nu_2$. On considère $P\nu_2 = \arg \min_{\nu_1 \in S} \|\nu_1 - \nu_2\|_{\mathbf{M}}$ où P est un opérateur de projection. Pour la contrainte S et $\nu_1 = (\nu_{1,1}, \dots, \nu_{1,K})'$, d'après la proposition 2.5.3, si on impose à $g = \sum_{j=1}^K B_{j,k} \nu_{1,j}$ d'être croissante, on a :

$$S = \{g \mid \nu_{1,j} \in \mathbb{R}, \nu_{1,1} \leq \nu_{1,2} \leq \dots \leq \nu_{1,K}\},$$

pour une contrainte unimodale concave, on a :

$$S = \{g \mid \nu_{1,j} \in \mathbb{R}, \nu_{1,1} < \nu_{1,2}, \nu_{1,K-1} > \nu_{1,K}, \nu_{1,j} - 2\nu_{1,j-1} + \nu_{1,j-2} \leq 0\},$$

et pour une contrainte unimodale, on a :

$$S = \{g \mid \nu_{1,j} \in \mathbb{R}, \nu_{1,1} = \nu_{1,2} < \nu_{1,3} \leq \dots \leq \nu_{1,l} \geq \nu_{1,l+1} \geq \dots \geq \nu_{1,K-1} > \nu_{1,K}, \text{ pour } l = 4, \dots, K-1\}.$$

La contrainte S est un convexe fermé et on conclut que, pour chaque ν_2 , il existe une projection unique de ν_2 dans l'espace contraint S .

Nous démontrons maintenant (4.16). Étant donné $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, on pose $\mathbf{b}_1 = P\mathbf{a}_1$ et $\mathbf{b}_2 = P\mathbf{a}_2$. Alors, en considérant la matrice définie positive \mathbf{M} et pour tout $\mathbf{z} \in S$, on a

$$(\mathbf{b}_1, \mathbf{z} - \mathbf{b}_1)_{\mathbf{M}} \geq (\mathbf{a}_1, \mathbf{z} - \mathbf{b}_1)_{\mathbf{M}} \quad (4.17)$$

et

$$(\mathbf{b}_2, \mathbf{z} - \mathbf{b}_2)_{\mathbf{M}} \geq (\mathbf{a}_2, \mathbf{z} - \mathbf{b}_2)_{\mathbf{M}}. \quad (4.18)$$

On choisit $\mathbf{z} = \mathbf{b}_2$ dans l'inégalité (4.17) et $\mathbf{z} = \mathbf{b}_1$ dans l'inégalité (4.18). On soustrait (4.18) de (4.17), on obtient

$$\begin{aligned} (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)_{\mathbf{M}} &\leq (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)_{\mathbf{M}} \\ &\leq \|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\|_{\mathbf{M}} \|\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2\|_{\mathbf{M}}, \end{aligned}$$

où $(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)_{\mathbf{M}} = \|\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2\|_{\mathbf{M}}^2$. Ainsi, on conclut que

$$\|\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2\|_{\mathbf{M}} \leq \|\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\|_{\mathbf{M}}. \quad (4.19)$$

On rappelle que les normes $\|\cdot\|$ et $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$ sont dites équivalentes si et seulement s'il existe deux nombres réels r_1 et r_2 strictement positifs tels que, pour tout ν_1 , les deux majorations suivantes sont vérifiées :

$$r_1 \|\nu_1\| \leq \|\nu_1\|_{\mathbf{M}} \leq r_2 \|\nu_1\|.$$

Nous obtenons le résultat (4.16) immédiatement en utilisant l'équivalence entre les deux normes $\|\cdot\|$ et $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$ dans (4.19). \square

Dans la suite, on note par $\widehat{\beta}^S = \mathbf{P}\widehat{\beta}$ et on s'intéresse à calculer le rapport de vraisemblance $p(\mathbf{y}|\kappa^c, \mathbf{t}^c)/p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t})$ dans le cas de la régression sous contraintes avec

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}) &= \iint p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \beta^S, \sigma^2) \pi_{\beta^S}(\beta^S|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2) \pi_{\sigma^2}(\sigma^2) d\beta^S d\sigma^2 \\ &= \iint p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \mathbf{P}\beta, \sigma^2) \pi_{\beta}(\beta|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2) \pi_{\sigma^2}(\sigma^2) d\beta d\sigma^2, \end{aligned} \quad (4.20)$$

où $p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \mathbf{P}\beta, \sigma^2)$ est la vraisemblance conditionnelle sachant les coefficients qui vérifient la contrainte S , les nœuds et la variance. Le rapport de vraisemblance sera utilisé pour construire une chaîne de simulation à sauts réversibles de distribution stationnaire $p(\mathbf{t}, \kappa|\mathbf{y})$ en présence des contraintes de forme. En utilisant la méthode de Laplace, nous montrons que le rapport de vraisemblance sous contraintes peut être approximer, en cas d'insertion d'un nœud, par (4.21) avec une erreur $O(n^{-1/2})$.

Proposition 4.4.2 *Pour une transition avec insertion de nœud d'un état courant (κ, \mathbf{t}) à un état candidat $(\kappa^c = \kappa + 1, \mathbf{t}^c)$, le rapport de vraisemblance sous contraintes est approximé par*

$$\frac{p(\mathbf{y}|\kappa^c, \mathbf{t}^c)}{p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t})} \simeq \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\beta}^S)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\beta}^S)}{(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}^c\widehat{\beta}^{Sc})'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}^c\widehat{\beta}^{Sc})} \right)^{n/2}, \quad (4.21)$$

où $\widehat{\beta}^{Sc} = \mathbf{P}\widehat{\beta}^c$, $\widehat{\beta}^c = (B_{\mathbf{t},k}^c{}'B_{\mathbf{t},k}^c)^{-1}B_{\mathbf{t},k}^c{}'\mathbf{y}$ et l'approximation (4.21) est d'erreur $O(n^{-1/2})$.

Preuve Nous utilisons la méthode de Laplace pour exprimer une approximation de l'intégration (4.20). On considère $\zeta \in \mathbb{R}^K$ et on pose

$$\psi(\zeta) = \frac{p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \mathbf{P}\zeta, \sigma^2)\pi_\beta(\zeta|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2)}{p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \zeta, \sigma^2)} \quad \text{et} \quad n\gamma(\zeta) = -\log \left(p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \zeta, \sigma^2) \right).$$

Nous pouvons vérifier facilement que

$$\psi(\zeta) \exp \left(-n\gamma(\zeta) \right) = p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \mathbf{P}\zeta, \sigma^2)\pi_\beta(\zeta|\mathbf{t}, \kappa, \sigma^2).$$

On note par $\widehat{\zeta}$ le maximum de $-\gamma$ et par Σ l'inverse de la matrice hessienne de γ évalué en $\widehat{\zeta}$: $\Sigma = (D^2\gamma(\widehat{\zeta}))^{-1} = n\sigma^2(B_{\mathbf{t},k}'B_{\mathbf{t},k})^{-1}$. En appliquant la proposition 4.4.1 pour $\Delta = \sqrt{n}(\zeta - \widehat{\zeta})$, on obtient

$$\|\mathbf{P}\left(\zeta + \frac{\Delta}{\sqrt{n}}\right) - \mathbf{P}\zeta\| \leq \frac{\varepsilon'}{\sqrt{n}}\|\Delta\|,$$

et on a $\psi(\zeta + \frac{\Delta}{\sqrt{n}}) = \psi(\zeta) + \frac{1}{\sqrt{n}}O(\|\Delta\|)$. Par application du théorème de Taylor, au voisinage de $\widehat{\zeta}$, on peut écrire $\gamma(\zeta) = \gamma(\widehat{\zeta}) + D\gamma(\widehat{\zeta})(\sqrt{n}\Delta) + \frac{1}{2}D^2\gamma(\widehat{\zeta})(\sqrt{n}\Delta)^2 + n\sqrt{n}O(\Delta^3)$. Puisque γ admet un maximum en $\widehat{\zeta}$, $D\gamma(\widehat{\zeta}) = 0$ et $D^2\gamma(\widehat{\zeta}) < 0$, on a alors $\gamma(\zeta) \simeq \gamma(\widehat{\zeta}) + \frac{1}{2}n\Delta'\Sigma^{-1}\Delta$.

En appliquant la méthode de Laplace, pour Ω une boule centrée en $\widehat{\zeta}$ et de rayon arbitraire r , pour $n \rightarrow \infty$, on peut écrire

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}, \sigma^2) &= \int \psi(\zeta) \exp\{-n\gamma(\zeta)\} d\zeta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} \int \psi(\zeta) \exp\{-n(\gamma(\zeta) - \gamma(\widehat{\zeta}))\} d\zeta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} \int_{\Omega} \psi(\zeta) \exp\{-n(\gamma(\zeta) - \gamma(\widehat{\zeta}))\} d\zeta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} \int_{\Omega} \psi(\zeta) \exp\left\{-\frac{n}{2}(\zeta - \widehat{\zeta})' \Sigma^{-1}(\zeta - \widehat{\zeta})\right\} d\zeta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} n^{-K/2} \int \psi\left(\widehat{\zeta} + \frac{\Delta}{\sqrt{n}}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\Delta' \Sigma^{-1} \Delta\right\} d\Delta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} n^{-K/2} \int \left(\psi(\widehat{\zeta}) + \frac{1}{\sqrt{n}} O(\|\Delta\|)\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\Delta' \Sigma^{-1} \Delta\right\} d\Delta \\
&= \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} \left(\frac{2\pi}{n}\right)^{K/2} |\Sigma|^{1/2} \psi(\widehat{\zeta}) \\
&= (2\pi\sigma^2)^{K/2} |B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k}|^{-1/2} \psi(\widehat{\zeta}) \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\}.
\end{aligned}$$

Une dernière intégration par rapport à la variance σ^2 , en notant par $\widehat{\zeta}^S = \mathbf{P}\widehat{\zeta}$, permet d'écrire

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t}) &= \int_0^\infty (2\pi\sigma^2)^{K/2} |B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k}|^{-1/2} \psi(\widehat{\zeta}) \exp\{-n\gamma(\widehat{\zeta})\} \pi_{\sigma^2}(\sigma^2) d\sigma^2 \\
&= \int_0^\infty (2\pi\sigma^2)^{K/2} |B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k}|^{-1/2} (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)\right\} \\
&\quad (2n\pi\sigma^2)^{-K/2} |B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k}|^{1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2n\sigma^2}\widehat{\zeta}'(B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})\widehat{\zeta}\right\} \frac{\tau_2^{\tau_1}}{\Gamma(\tau_1)} (\sigma^2)^{-(\tau_1+1)} \exp\left\{-\frac{\tau_2}{\sigma^2}\right\} d\sigma^2 \\
&= \frac{1}{n^{K/2}} (2\pi)^{-n/2} \frac{\tau_2^{\tau_1}}{\Gamma(\tau_1)} \frac{\Gamma(n/2)}{\left((\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)\right)^{n/2}}, \tag{4.22}
\end{aligned}$$

en remarquant que $\exp\left\{-\frac{1}{2n\sigma^2}\widehat{\zeta}'(B'_{\mathbf{t},k} B_{\mathbf{t},k})\widehat{\zeta}\right\} \rightarrow 1$ quand $n \rightarrow \infty$ et en considérant que τ_1, τ_2 sont très proches de 0. Ainsi, d'après (4.22), le rapport de vraisemblance est donné, en cas d'insertion d'un nœud, par

$$\frac{p(\mathbf{y}|\kappa^c, \mathbf{t}^c)}{p(\mathbf{y}|\kappa, \mathbf{t})} \simeq \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}\widehat{\zeta}^S)}{(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}^c\widehat{\zeta}^{Sc})'(\mathbf{y} - B_{\mathbf{t},k}^c\widehat{\zeta}^{Sc})} \right)^{n/2},$$

où l'erreur de l'approximation est $O(n^{-1/2})$. □

En cas de régression bayésienne sans contraintes de forme, Kass and Wasserman (1996) ont montré que le BIC est une bonne approximation du facteur de Bayes. Dans la proposition 4.4.2, nous avons montré que l'approximation est conservée également dans la régression sous contraintes. Cette approximation, donnée par (4.21), est d'erreur $O(n^{-1/2})$ et produit une distribution a posteriori pour les paramètres (\mathbf{t}, κ) avec une erreur $O(n^{-1/2})$ également. L'implémentation de l'approximation nécessite le calcul de $\widehat{\beta}^S = \mathbf{P}\widehat{\beta}$ par un algorithme de type recuit simulé dont l'étape de proposition permet d'introduire la contrainte S . On précise à ce niveau que le schéma de simulation en présence de contraintes de forme est très coûteux (sur le plan du temps de simulation) à cause de la projection par le recuit simulé après chaque itération du Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Pour résoudre cet aspect, nous proposons une meilleure solution dans la suite en chapitre 5.

4.5 Le Metropolis-Hastings à sauts réversibles

Les simulations suivant la loi a posteriori $p(\kappa, \mathbf{t}|\mathbf{y})$ par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles consistent à construire une chaîne de Markov avec des propriétés de stabilité forte. Les états de la chaîne représentent la dimension et la position des nœuds pour les fonctions de régression intermédiaires f_κ dans les simulations. L'espace d'état pour les simulations est $\mathcal{X} = \cup_{\kappa \in \mathcal{K}} (\{\kappa\} \times \mathcal{X}'_\kappa)$ où $\mathcal{K} = \{1, \dots, \kappa_{\max}\}$ et $\mathcal{X}'_\kappa \subset [a, b]^{n_\kappa}$. Les propriétés de stabilité forte de la chaîne assurent l'existence d'une distribution stationnaire et autorise à la chaîne des déplacements sur tout l'espace \mathcal{X} (propriété de l'irréductibilité). La propriété de récurrence assure que le nombre moyen de visites dans \mathcal{X} est infini (Liu, 2001). Roberts and Rosenthal (2006) ont démontré que la chaîne à sauts réversibles est Harris-récurrente. Cette dernière propriété assure que la probabilité d'un nombre infini de visites dans \mathcal{X} est 1. Sur l'espace \mathcal{X} , les dimensions $\{n_\kappa\}$ varient dans les simulations. La chaîne à sauts réversibles est produite selon le même paradigme que le Metropolis-Hastings (à savoir une étape de proposition suivie d'une étape d'acceptation/rejet) et dont la particularité d'être flexible aux dimensions variables des espaces d'états.

Dans la suite, on présente la construction de la chaîne à sauts réversibles tout en décrivant les transitions entre les différents états dans \mathcal{X} . On explique le problème de trans-dimensions dans la chaîne de simulation et on présente un algorithme de simulation qui décrit les différents types de mouvements et le choix entre les splines simulées. Pour

plus de détails sur le Metropolis-Hastings à sauts réversibles, on pourra consulter Green (1995, 2003).

4.5.1 Représentation constructive

Pour simuler (\mathbf{t}, κ) on construit une chaîne à sauts réversibles sur l'espace d'états \mathcal{X} . Dans sa construction, la chaîne vérifie un équilibre de probabilité entre chaque transition et son inverse. Cet équilibre assure que si l'état de la chaîne est à un ensemble A et se rend dans un ensemble B , alors cette transition et son inverse sont identiques lorsque A et B sont inversés. En considérant l'état actuel (\mathbf{t}, κ) de la chaîne et l'état candidat (\mathbf{t}^c, κ^c) , la transition de l'état actuel à l'état candidat s'effectue en générant une perturbation u à partir d'une distribution connue g et en choisissant une fonction déterministe convenable \mathcal{L} telle que $(\mathbf{t}^c, \kappa^c) = \mathcal{L}(\mathbf{t}, \kappa, u)$. Inversement, on peut exprimer la transition de l'état candidat à l'état actuel par une fonction inverse \mathcal{L}' telle que $(\mathbf{t}, \kappa, u) = \mathcal{L}'(\mathbf{t}^c, \kappa^c)$. Il sera convenable de poser $z = (\mathbf{t}, \kappa)$, $z^c = (\mathbf{t}^c, \kappa^c)$ et $q(z, z^c)$ un noyau de probabilité, choisi arbitrairement, qui permet de proposer un état z^c en partant de z . La transition de l'état actuel à l'état candidat sera acceptée avec une probabilité $\alpha(z, z^c)$ et la transition inverse avec une probabilité $\alpha(z^c, z)$. L'équilibre de probabilité s'écrit alors de la façon suivante :

$$\int_{(z, z^c) \in A \times B} p(z|\mathbf{y})q(z, z^c)g(u)\alpha(z, z^c)dzdu = \int_{(z, z^c) \in A \times B} p(z^c|\mathbf{y})q(z^c, z)\alpha(z^c, z)dz^c. \quad (4.23)$$

Les fonctions \mathcal{L} et son inverse \mathcal{L}' sont continûment différentiables. En appliquant la formule de changement de variables dans la seconde intégrale en (4.23), l'équilibre de probabilité s'établit lorsque :

$$p(z|\mathbf{y})q(z, z^c)g(u)\alpha(z, z^c) = p(z^c|\mathbf{y})q(z^c, z)\alpha(z^c, z) \left| \frac{\partial(\mathbf{t}^c, \kappa^c)}{\partial(\mathbf{t}, \kappa, u)} \right|,$$

où le dernier facteur est le Jacobien de la transition de l'état (\mathbf{t}, κ) à l'état (\mathbf{t}^c, κ^c) . Green (1995) a proposé la probabilité d'acceptation/rejet donnée par :

$$\alpha(z, z^c) = \min \left\{ 1, \frac{p(z^c|\mathbf{y})q(z^c, z)}{p(z|\mathbf{y})q(z, z^c)g(u)} \left| \frac{\partial(\mathbf{t}^c, \kappa^c)}{\partial(\mathbf{t}, \kappa, u)} \right| \right\} \quad (4.24)$$

pour la chaîne à sauts réversibles.

4.5.2 Le problème de trans-dimensions dans la chaîne de simulation

Les nœuds changent de dimension dans la chaîne à sauts réversibles. La transition de l'état (\mathbf{t}, κ) à l'état (\mathbf{t}^c, κ^c) fait intervenir une fonction $\mathcal{L} : [a, b]^\kappa \times \mathcal{K} \times [a, b]^{n_u} \rightarrow [a, b]^{\kappa^c} \times \mathcal{K}$ où n_u est le nombre de valeurs tirées aléatoirement de la distribution g pour la perturbation u . La transition inverse fait intervenir une fonction $\mathcal{L}' : [a, b]^{\kappa^c} \times \mathcal{K} \rightarrow [a, b]^\kappa \times \mathcal{K} \times [a, b]^{n_u}$. Les fonctions \mathcal{L} et \mathcal{L}' seront utilisées respectivement dans $(\mathbf{t}^c, \kappa^c) = \mathcal{L}(\mathbf{t}, \kappa, u)$ et $(\mathbf{t}, \kappa, u) = \mathcal{L}'(\mathbf{t}^c, \kappa^c)$. Dans les simulations, la dimension des nœuds candidats κ^c doit vérifier à chaque transition l'égalité suivante : $\kappa + n_u = \kappa^c$.

4.5.3 Les types de mouvements et le choix entre splines

Comme a été indiqué dans la section 4.3, le travail qu'on propose consiste à produire une chaîne de Markov dont la distribution stationnaire est la distribution marginale a posteriori des paramètres (\mathbf{t}, κ) . La modification de la dimension et la position des nœuds revient à définir trois types de déplacements possibles dans les états de la chaîne à sauts réversibles :

- (i) insertion d'un nœud \bar{t} et d'un coefficient de régression $\beta_j^{(l)}$;
- (ii) suppression d'un nœud et d'un coefficient de régression ;
- (iii) déplacement d'un nœud et d'un coefficient de régression.

Il est clair que les déplacements (i) et (ii) induisent un changement de dimension dans la chaîne. Le déplacement (iii) s'obtient d'une manière naturelle en simulant les deux déplacements (i) et (ii) (suppression+insertion) au même temps. Après chaque déplacement, le rééquilibrage des coefficients et la simulation de la variance σ^2 seront proposés selon le schéma décrit par deux étapes de Gibbs en section 4.3.2 ou le schéma décrit en section 4.4. Les simulations par la chaîne à sauts réversibles nécessitent le calcul de la probabilité d'acceptation/rejet (4.24) à chaque transition. L'insertion, la suppression et le simple déplacement d'un nœud sont choisis dans la chaîne comme événement candidat respectivement avec les probabilités b_κ , d_κ et db_κ données par :

$$b_\kappa = e \min\{1, \pi_\kappa(\kappa + 1)/\pi_\kappa(\kappa)\}, \quad d_\kappa = e \min\{1, \pi_\kappa(\kappa - 1)/\pi_\kappa(\kappa)\} \quad \text{et} \quad db_\kappa = 1 - b_\kappa - d_\kappa,$$

où $e \in [0, 0.5]$. Si $e > 0.5$, la somme de probabilité $b_\kappa + d_\kappa$ peut dépasser 1 pour certaines valeurs de $\kappa \in \mathcal{K}$. Ces probabilités vérifient que $b_\kappa \pi_\kappa(\kappa) = d_{\kappa+1} \pi_\kappa(\kappa + 1)$. Dans les simulations, on a remarqué que $e = 0.4$ est une bonne valeur dans le choix des événements.

On suppose que l'état courant dans la chaîne est représenté par une fonction de régression intermédiaire f_k obtenue par les κ nœuds. Un événement d'insertion d'un nœud sera choisi avec une probabilité b_κ dans la chaîne. À partir de la séquence nodale $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_\kappa)'$, on choisit uniformément un nœud $t_{i^*} \sim \mathcal{U}_{\{t_1, \dots, t_\kappa\}}$. Pour générer le nœud à insérer \bar{t} , la configuration nodale sera modifiée grâce à une heuristique qu'on décrit dans la suite (Zhou and Shen, 2001). En considérant une distribution φ , le nœud à insérer \bar{t} est généré par la distribution φ centrée en t_{i^*} où $\bar{t} \sim \varphi(\cdot | t_{i^*})$. On pose comme distribution φ pour l'heuristique une loi Beta $\mathcal{B}(t_{i^*} \times \mu, (1 - t_{i^*}) \times \mu)$ où $\mu = 50$. Alors, le noyau de probabilité d'une transition avec insertion d'un nœud est donné par :

$$q(t_1, \dots, t_{\kappa+1} | t_1, \dots, t_\kappa) = b_\kappa \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \mathcal{B}(t_i \times \mu, (1 - t_i) \times \mu). \quad (4.25)$$

Le noyau de transition donné par (4.25) apparaît comme un produit de b_κ et un mélange de densités Beta. Ainsi, le nœud à insérer \bar{t} peut être généré par l'une des κ distributions différentes.

Remarque D'autres exemples de distributions pour modéliser l'insertion des nœuds peuvent être proposées. Par exemple, on pourra éventuellement poser $\varphi \propto \mathcal{N}(t_{i^*}, \varsigma^2) \mathbf{1}_{[t_{i^*}-\tau, t_{i^*}+\tau]}$ où ς^2 est la variance de la loi Normale tronquée et $\tau = \kappa^{-1}|b - a|$. Quand $t_i - \tau < a$ la fonction indicatrice devient $\mathbf{1}_{[t_i, t_i+\tau]}$ et lorsque $t_i + \tau > b$ la fonction indicatrice est remplacée par $\mathbf{1}_{[t_i-\tau, t_i]}$.

Nous posons $\mathbf{t}^c = \mathbf{t} \cup \bar{t}$. L'acceptation ou le rejet de la proposition (κ^c, \mathbf{t}^c) dépend de la probabilité :

$$\alpha_b = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c)}{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa)} \times \frac{\pi_\kappa(\kappa^c) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c)}{\pi_\kappa(\kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa)} \times \frac{q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}{q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c) g(u)} \times |J| \right\},$$

où le rapport de vraisemblance $p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c) / p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa)$ est donné par (4.12) en cas de régression sans contraintes et par (4.21) en présence des contraintes. Le rapport de prior est donné par :

$$\frac{\pi_\kappa(\kappa^c) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c)}{\pi_\kappa(\kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa)} = \frac{\pi_\kappa(\kappa + 1) \pi_{\mathbf{t}}(t_1, \dots, \bar{t}, \dots, t_{\kappa+1} | \kappa + 1)}{\pi_\kappa(\kappa) \pi_{\mathbf{t}}(t_1, \dots, t_\kappa | \kappa)} = \frac{\lambda}{(\kappa + 1)} \frac{(\kappa + 1)}{(b - a)} = \frac{\lambda}{(b - a)},$$

où le terme $\lambda / (\kappa + 1)$ est obtenu par le rapport de deux lois de Poisson tronquées. Le rapport de proposition $q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t}) / q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c)$ est donné par :

$$\frac{q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c)}{q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t}) g(u)} = \frac{d_{\kappa+1} (\kappa + 1)^{-1}}{b_\kappa \kappa^{-1} \sum_i \mathcal{B}(t_i \times \mu, (1 - t_i) \times \mu)}.$$

Le facteur $|J|$ est le Jacobien ou le déterminant de la matrice jacobienne relative à la transition avec insertion de nœud. On pose $\mathbf{t}^c = (t'_1, \dots, \bar{t}, \dots, t'_\kappa, t'_{\kappa+1})'$, le calcul de ce Jacobien revient à calculer le déterminant de la matrice des dérivées partielles $\partial(\mathbf{t}^c, \kappa^c)/\partial(\mathbf{t}, \kappa, u)$. Plus précisément, on rappelle que $\bar{t} \sim \mathcal{B}(t_{i^*} \times \mu, (1 - t_{i^*}) \times \mu)$, nous obtenons deux vecteurs de même dimension $\kappa + 2$ en considérant $(\kappa, \mathbf{t}, \bar{t})$ et $(\kappa + 1, \mathbf{t}^c)$. On peut alors calculer $|J|$ de la manière suivante

$$\begin{aligned} \frac{1}{|J|} &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial(\kappa)}{\partial(\kappa+1)} & \frac{\partial(t_1)}{\partial(\kappa+1)} & \cdots & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(\kappa+1)} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(\kappa+1)} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(\kappa+1)} \\ \frac{\partial(\kappa)}{\partial(t'_1)} & \frac{\partial(t_1)}{\partial(t'_1)} & \cdots & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(t'_1)} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(t'_1)} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(t'_1)} \\ \cdots & \cdots & \frac{\partial(t_2)}{\partial(t'_2)} & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(t'_2)} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(t'_2)} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(t'_2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(\bar{t})} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(\bar{t})} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(\bar{t})} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial(\kappa)}{\partial(t'_\kappa)} & \frac{\partial(t_1)}{\partial(t'_\kappa)} & \cdots & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(t'_\kappa)} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(t'_\kappa)} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(t'_\kappa)} \\ \frac{\partial(\kappa)}{\partial(t'_{\kappa+1})} & \frac{\partial(t_1)}{\partial(t'_{\kappa+1})} & \cdots & \cdots & \frac{\partial(\bar{t})}{\partial(t'_{\kappa+1})} & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(t'_{\kappa+1})} & \cdots & \frac{\partial(t_\kappa)}{\partial(t'_{\kappa+1})} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \frac{\partial(t_{i^*})}{\partial(\bar{t})} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 1 & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = 1. \end{aligned}$$

Un événement de suppression d'un nœud sera choisi avec une probabilité d_κ dans la chaîne à sauts réversibles. On suppose que l'état courant dans la chaîne est représenté par la fonction de régression intermédiaire f_k obtenue par les κ nœuds en positions t_1, \dots, t_κ . Le nœud à supprimer est tiré uniformément à partir des nœuds existants dans le vecteur \mathbf{t} . La transition de l'état (κ, \mathbf{t}) à l'état $(\kappa^c = \kappa - 1, \mathbf{t}^c)$ s'effectue avec les noyaux de probabilités donnés par :

$$q(\mathbf{t}^c | \mathbf{t}) = d_\kappa \frac{1}{\kappa} \quad \text{et} \quad \frac{q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c)}{q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})g(u)} = \frac{b_\kappa(\kappa)^{-1} \sum_i \mathcal{B}(t_i \times \mu, (1 - t_i) \times \mu)}{d_{\kappa+1}(\kappa + 1)^{-1}}.$$

L'acceptation ou le rejet de la proposition (κ^c, \mathbf{t}^c) dépend de la probabilité d'acceptation/rejet α_d . Le calcul de la probabilité α_d s'obtient d'une manière similaire au calcul de α_b .

Le remplacement d'un nœud sera choisi avec une probabilité db_κ . On choisit uniformément un nœud à éliminer $t_{i^*} \sim \mathcal{U}_{\{t_1, \dots, t_\kappa\}}$ à partir des nœuds présents dans le vecteur \mathbf{t} . Le nœud candidat \bar{t} est tiré aléatoirement à partir de la distribution $\bar{t} \sim \mathcal{B}(t_{i^*} \times \mu, (1 - t_{i^*}) \times \mu)$ définie précédemment. La transition de l'état courant \mathbf{t} à l'état candidat \mathbf{t}^c , où $\kappa^c = \kappa$, s'effectue avec un noyau de probabilité donné par :

$$q(\mathbf{t}^c | \mathbf{t}) = db_\kappa \frac{1}{\kappa} \mathcal{B}(t_{i^*} \times \mu, (1 - t_{i^*}) \times \mu).$$

Précisément, ce dernier type de transition consiste à remplacer un nœud et régler les coefficients de régression en éliminant et insérant un nouveau coefficient pour équilibrer la chaîne de simulation.

À la suite de chaque événement d'insertion, de suppression ou de remplacement d'un nœud, les coefficients de la régression seront générés suivant le schéma de simulation décrit en section 4.3.2 en cas de régression sans contraintes et suivant le schéma de simulation décrit en section 4.4 en cas de régression sous contraintes. En ce qui concerne la variance, elle sera générée dans les deux cas par une étape de Gibbs en utilisant sa loi a posteriori conditionnelle $p(\sigma_{(l)}^2 | \beta^{(l)}, \mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)}, \mathbf{y})$.

L'équilibre entre les différentes transitions proposées dans la chaîne à sauts réversibles est maintenu grâce à l'égalité $b_\kappa \pi_\kappa(\kappa) = d_{\kappa+1} \pi_\kappa(\kappa + 1)$. Cet équilibre garantit les bonnes propriétés de la chaîne de simulation. En considérant la distribution marginale a posteriori $p(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{y})$ et un noyau de transition $q(\cdot, \cdot | \mathbf{t}, \kappa)$, nous nous intéressons à démontrer dans la suite l'équilibre de la chaîne décrite précédemment.

Proposition 4.5.1 *Soit $p(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{y})$ la distribution marginale a posteriori du couple (\mathbf{t}, κ) et $q(E^c | E)$ le noyau de transition dans la chaîne à sauts réversibles de l'état E à l'état E^c . Alors,*

$$p(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{y}) q(\mathbf{t}^c, \kappa^c | \mathbf{t}, \kappa) g(u) = p(\mathbf{t}^c, \kappa^c | \mathbf{y}) q(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{t}^c, \kappa^c) |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}|,$$

où $|J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}|$ est le Jacobien de la transition de la valeur courante du couple (κ, \mathbf{t}) à l'état candidat (κ^c, \mathbf{t}^c) .

Preuve : Pour des raisons de simplicité, nous démontrons l'équilibre de la chaîne à sauts réversibles seulement pour une transition avec insertion d'un nœud sachant que la démonstration pour les deux autres types de transition se déroule d'une manière similaire.

On pose $(\kappa, \mathbf{t}) = (\kappa, t_1, \dots, t_\kappa)$ et $(\kappa^c, \mathbf{t}^c) = (\kappa + 1, t_1, \dots, \bar{t}, \dots, t_{\kappa+1})$.

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{y}) q(\mathbf{t}^c, \kappa^c | \mathbf{t}, \kappa) g(u) &= \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) \pi_\kappa(\kappa)}{p(\mathbf{y})} g(u) b_\kappa \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \mathcal{B}(t_i \times \mu, (1 - t_i) \times \mu) \alpha_b \\
&= \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) \pi_\kappa(\kappa)}{p(\mathbf{y})} g(u) b_\kappa \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \mathcal{B}(t_i \times \mu, (1 - t_i) \times \mu) \\
&\quad \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c) \pi_{\kappa^c}(\kappa^c)}{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) \pi_\kappa(\kappa)} \frac{q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c)}{q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t}) g(u)} |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}| \right\} \\
&= \frac{1}{p(\mathbf{y})} \min \left\{ p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) \pi_\kappa(\kappa) q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t}) g(u), p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c) \right. \\
&\quad \left. \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c) \pi_{\kappa^c}(\kappa^c) q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c) |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}| \right\} \\
&= \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c) \pi_{\kappa^c}(\kappa^c)}{p(\mathbf{y})} q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c) |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}| \\
&\quad \min \left\{ \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}, \kappa) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t} | \kappa) \pi_\kappa(\kappa) q(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t}) g(u)}{p(\mathbf{y} | \mathbf{t}^c, \kappa^c) \pi_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}^c | \kappa^c) \pi_{\kappa^c}(\kappa^c) q(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c) |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}|}, 1 \right\} \\
&= p(\mathbf{t}^c, \kappa^c | \mathbf{y}) q(\mathbf{t}, \kappa | \mathbf{t}^c, \kappa^c) |J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}|,
\end{aligned}$$

où $\frac{1}{|J_{(\kappa^c, \mathbf{t}^c | \kappa, \mathbf{t})}|} = |J_{(\kappa, \mathbf{t} | \kappa^c, \mathbf{t}^c)}|$. □

4.5.4 Étude théorique de la chaîne de simulation

Pour la régression sans contraintes, on peut prouver que l'algorithme de la chaîne à sauts réversible converge, c'est à dire que sa chaîne de Markov associée est ergodique. Cette ergodicité peut être démontrée en prouvant l'irréductibilité et l'apériodicité de la chaîne. Toutefois, un résultat plus fort peut être prouvé en montrant que la chaîne de Markov converge géométriquement à la distribution stationnaire cible. La preuve ne sera pas détaillée dans ce chapitre en raison de sa similarité avec celle proposée par Vermaak et al. (2000).

4.6 Étude de simulation

On présente une étude de simulation pour illustrer la méthode de régression avec B-splines à nœuds variables et les simulations par l'algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. L'implémentation de la méthode bayésienne se déroule en calculant les probabilités d'acceptation/rejet définies précédemment et en appliquant l'heuristique pour proposer des positions aux nœuds. Nous calculons l'estimateur \hat{f} de la fonction

inconnue f en estimant l'espérance à posteriori. Nous estimons l'espérance a posteriori par la loi des grands nombres en utilisant les états de la chaîne de Markov à sauts réversibles. L'algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles est itéré 100000 itérations où sa convergence est détectée après les 20000 premières itérations.

Dans cette étude de simulation, on considère trois exemples de fonctions déterministes.

(i) Une fonction f_1 définie par une spline à variation lente sur $[0, 1]$:

$$f_1(x) = \sum_{i=1}^7 \beta_i^{f_1} B_{i,k}(x),$$

où $\beta^{f_1} = (-1, 20, 4, 6, 10, 11, 12)'$ et $\mathbf{t}^{f_1} = (0.2, 0.6, 0.7)'$. La fonction f_1 est évaluée sur une grille régulière de 101 points. L'erreur aléatoire tirée d'une distribution normale d'espérance zéro et de variance $\sigma^2 = 0.81$ est rajoutée à la vraie fonction f_1 .

(ii) Une fonction f_2 à pic aigu définie sur $[-2, 2]$ par :

$$f_2(x) = \sin(x) + 2 \exp(-30x^2).$$

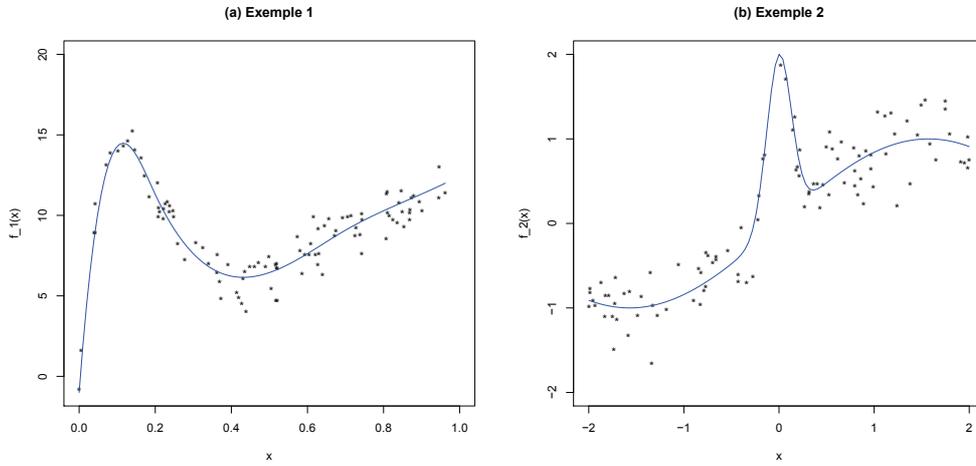
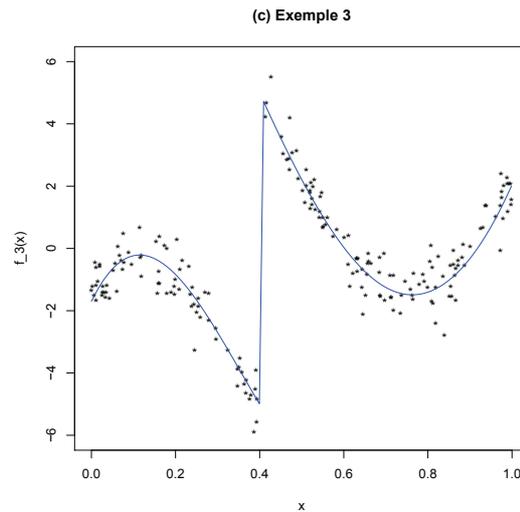
La fonction f_2 est évaluée en 101 points équidistants et la variance de l'erreur aléatoire est choisie égale à $\sigma^2 = 0.09$.

(iii) Une fonction f_3 définie par une spline discontinue sur $[0, 1]$:

$$f_3(x) = \sum_{i=1}^9 \beta_i^{f_3} B_{i,k}(x),$$

où $\beta^{f_3} = (-1.7, 2, -2, -5, 5, 2, -3, -1, 2)'$ et $\mathbf{t}^{f_3} = (0.4, 0.4, 0.4, 0.4, 0.7)'$. La fonction f_3 est évaluée sur une grille régulière de 201 points sur $[0, 1]$. L'erreur aléatoire tirée d'une distribution normale d'espérance zéro et d'écart type $\sigma = 0.55$ est rajoutée à la vraie fonction f_3 .

Les trois dernières fonctions avec les données simulées sont présentés dans la figure 4.1.

(a) f_1 est une spline à variation lente.(b) f_2 est une fonction à pic aigu.(c) f_3 est une spline discontinue.**Figure 4.1** – Les vraies fonctions utilisées dans l'étude de simulation et les données simulées.

Les fonctions f_1 , f_2 et f_3 ont été utilisées par DiMatteo et al. (2001) pour une étude de simulation comparée avec d'autres méthodes. Nous utilisons les résultats de simulation de DiMatteo et al. (2001) pour mener une comparaison entre la méthode bayésienne à nœuds variables (BRFK) proposée dans ce chapitre et les méthodes citées dans l'article de DiMatteo et al. (2001).

Plus précisément, on s'intéresse à calculer un risque, par exemple l'erreur quadratique

moyenne (MSE) dite aussi le risque quadratique, pour notre méthode bayésienne :

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\widehat{f}(x_i) - f(x_i) \right)^2.$$

Les moyennes de l'erreur quadratique moyenne, avec l'erreur standard, calculées sur la base de 10 simulations par Metropolis-Hastings à sauts réversibles sont reportées dans le tableau suivant (on précise que nous utilisons directement les résultats numériques cités dans DiMatteo et al. (2001) pour les méthodes DMS, Modifief-DMS et BARS) :

	DMS	Modifief-DMS	BARS	BRFK
Fonction f_1	0.206 (0.029)	0.103 (0.019)	0.066 (0.007)	0.0599 (0.0073)
Fonction f_2	0.025 (0.002)	0.012 (0.001)	0.008 (0.001)	0.0076 (0.0016)
Fonction f_3	0.106 (0.007)	0.091 (0.004)	0.019 (0.003)	0.0174 (0.0036)

où DMS est la méthode de Denison et al. (1998), Modifief-DMS est la méthode modifiée de Denison et al. (1998), BARS (Bayesian adaptive regression splines) est la méthode de DiMatteo et al. (2001) et BRFK (Bayesian regression with free-knots B-spline) est notre méthode.

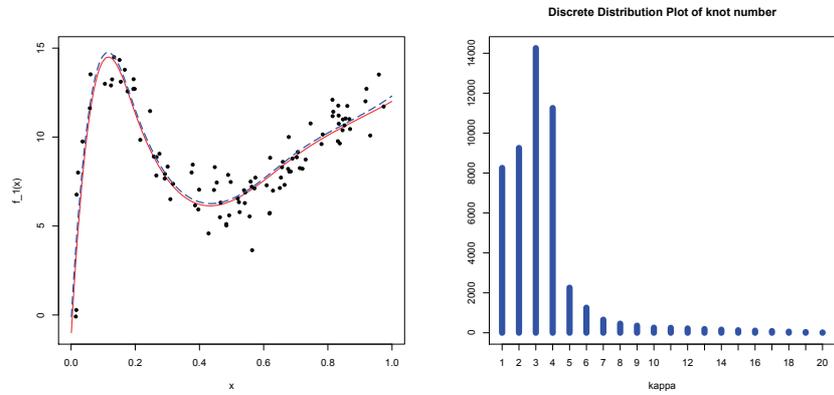
Pour obtenir les résultats numériques de la méthode BRFK présentés dans le tableau ci-dessus, nous avons simulés les trois fonctions f_1 , f_2 et f_3 d'une manière identique à celle décrite dans DiMatteo et al. (2001). En comparant les résultats de simulations dans le tableau ci-dessus, on remarque que le schéma de simulation par Metropolis-Hastings à sauts réversibles et l'échantillonneur de Gibbs présenté dans ce chapitre a permis d'améliorer, au sens du critère MSE, l'estimation des fonctions f_1 , f_2 et f_3 . Les résultats de simulations de la méthode BRFK sont obtenus en utilisant une loi de poisson tronquée ($\mathcal{K} = \{1, \dots, 20\}$) de paramètre $\lambda = 5$ comme prior sur la dimension κ des nœuds. Le choix de λ a été fixé suite à des tests de plusieurs valeur :

λ	1	3	5	7	10	15	20
MSE (f_1)	0.169	0.087	0.051	0.084	0.087	0.103	0.127

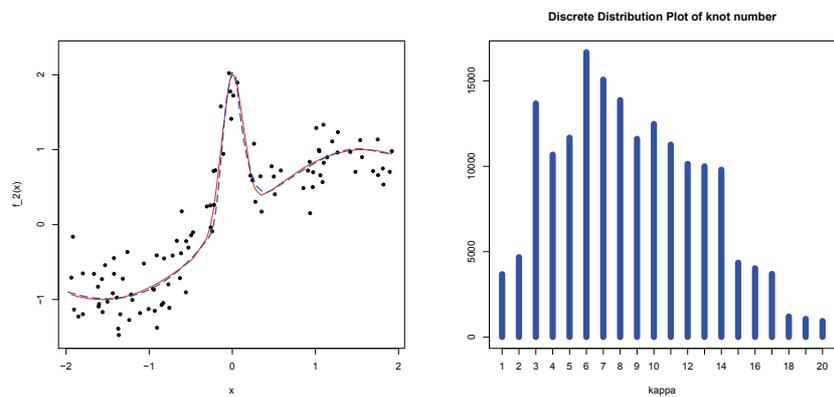
Les estimateurs de f_1 , f_2 et f_3 calculés par l'espérance a posteriori et les distributions a posteriori de κ sont présentés dans la Figure 4.2.

4.7 Discussion

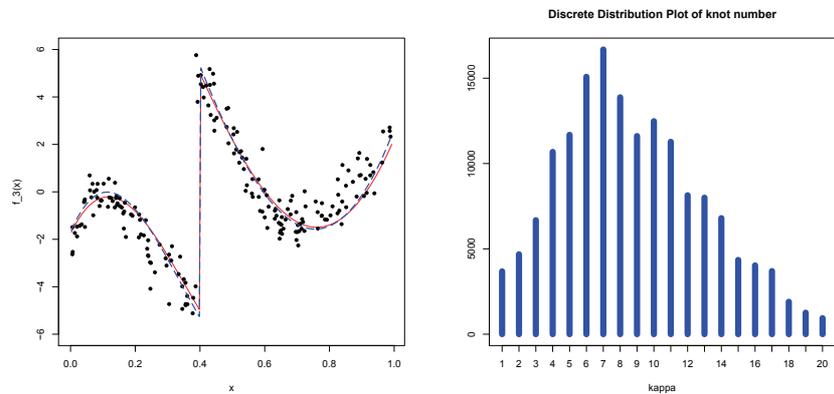
Dans ce chapitre, nous avons proposé une méthode de modélisation de la régression bayésienne basée sur les B-splines à nœuds variables. Cette méthode est caractérisée



(a) La vraie fonction f_1 et son estimateur. (b) Histogramme de la distribution a posteriori de κ (pour f_1).



(c) La vraie fonction f_2 et son estimateur. (d) Histogramme de la distribution a posteriori de κ (pour f_2).



(e) La vraie fonction f_3 et son estimateur. (f) Histogramme de la distribution a posteriori de κ (pour f_3).

Figure 4.2 – Application de la méthode bayésienne avec B-splines à nœuds variables (BRFK) pour l’estimation des fonctions f_1 , f_2 et f_3 . Les vraies fonctions en rouge et leurs espérances a posteriori en bleu.

par les simulations découplée de la dimension et la position des nœuds, d'une part, et les coefficients de régression et la variance, d'autre part. Des simulations suivant la loi a posteriori marginale des nœuds ont été proposées grâce à un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Les coefficients de régression ont été simulés de deux manières en absence de contraintes de forme et en présence de contraintes. La variance a été simulée par un échantillonneur de Gibbs en utilisant sa loi conditionnelle a posteriori $p((\sigma^2)^{(l)}|\beta^{(l)}, \mathbf{t}^{(l)}, \kappa^{(l)}, \mathbf{y})$. En particulier, la fonction de régression inconnue f a été estimée par l'espérance a posteriori.

Le cadre bayésien de l'approche proposée consiste à faire de l'inférence à partir d'une distribution a posteriori définie sur l'espace des paramètres de la régression. La première difficulté rencontrée est la spécification des lois a priori pour les paramètres associés à l'estimateur de la fonction f . La seconde difficulté est le choix entre les splines dans les simulations et la construction des déplacements de la chaîne à sauts réversibles (suppression, insertion et déplacement). Les résultats numériques de la méthode bayésienne, en absence de contraintes de forme, ont présenté une amélioration significative (au sens du risque quadratique) des performances prédictives par rapport à d'autres méthodes bayésiennes citées en littératures.

Le problème d'introduire des contraintes de forme dans le cadre de la régression bayésienne avec B-splines à nœuds variables a été traité seulement par la projection des coefficients de la régression sans contraintes sur un espace sous contraintes. Ce schéma de simulation s'est avéré très coûteux en terme de temps de simulation à cause de la projection par un recuit simulé après chaque itération de Metropolis-Hastings à sauts réversibles. La difficulté majeure dans le traitement de la question des contraintes dans la régression bayésienne à nœuds variables réside dans complexité, sur le plan de simulation, d'un rapport de prior des coefficients de régression β . Le calcul d'un rapport de deux distributions de probabilités tronquées (normales ou autres) et de dimensions différentes nécessite un développement qui dépasse le cadre de ce chapitre. Pour approfondir l'étude des contraintes de forme en utilisant les B-splines à nœuds variables, nous proposons dans le chapitre suivant une étude en détails de l'estimation bayésienne avec B-splines à nœuds variables d'une fonction de régression sous contraintes de régularité et de forme.

5

Régression bayésienne sous contraintes avec B-splines à nœuds variables

Résumé : L'objet de ce chapitre est de proposer un estimateur bayésien d'une fonction de régression sous contrainte de forme et de régularité avec B-splines à nœuds variables. Les contraintes de forme seront prises en compte grâce à la loi a priori sur les coefficients de régression. La contrainte de régularité sera contrôlée par l'ordre de la B-spline. Pour faire de l'inférence statistique sur le nombre et la position des nœuds, nous proposons un modèle Multinomial-Dirichlet. Une fois les lois a priori spécifiées sur l'ensemble des paramètres inconnus, nous dérivons, à une constante près, la loi a posteriori. Nous estimons la fonction de régression par le mode a posteriori. Ce mode est calculé grâce à un algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo (SAMC) dont l'étape de proposition garantit la prise en compte de la contrainte de forme. Des simulations suivant la loi a posteriori, par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles avec l'échantillonneur de Gibbs, seront proposées également.

5.1 Introduction

Nous considérons le modèle de régression, pour un vecteur de réponse $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ et un vecteur explicatif $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$,

$$\begin{cases} y_j = f(x_j) + \varepsilon_j, & j = 1, \dots, n, \\ f(x) = \sum_{i=1}^K \beta_i B_{i,k}(x), & \forall x \in [a, b], \end{cases} \quad (5.1)$$

où $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ est une fonction inconnue et $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)'$ est l'erreur de distribution Normale d'espérance nulle $\varepsilon_j \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$ avec $\sigma^2 < \infty$. L'entier $K < n$ désigne la dimension du vecteur des nœuds intérieurs $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_\kappa)'$ plus l'ordre k des fonctions B-splines ($K = \kappa + k$).

Pour une estimation flexible et parcimonieuse de f , nous devons choisir attentivement les positions des nœuds $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_\kappa)'$ et leur dimension κ . En littérature, des discussions à propos du nombre et de la position des nœuds dans la modélisation par spline peuvent être trouvées dans Parker and Rice (1985), O'Sullivan (1986), Kelly and Rice (1990), Hastie (1996), Eilers and Marx (1996), Ruppert (2002), Wand (2003) et Claeskens et al. (2009). Sur le plan théorique, Kauermann et al. (2009) ont discuté les propriétés asymptotiques d'un estimateur bayésien construit à partir d'une spline de lissage et dont la dimension de la base B-spline augmente avec la taille de l'échantillon. Claeskens et al. (2009) ont justifié, en fonction du nombre des nœuds et la taille des données, que les propriétés théoriques des splines de régression pénalisées sont similaires à celles des splines de régression et des splines de lissage. Sur le plan appliqué, on peut citer la méthode de sélection pas à pas des nœuds (Stone et al., 1997), l'algorithme de Leitenstorfer and Tutz (2007) avec des fonctions à bases radiales et les méthodes bayésiennes de Denison et al. (1998) et DiMatteo et al. (2001). Dans les travaux appliqués, l'inférence statistique sur les nœuds est généralement effectuée en considérant une collection de nœuds présélectionnée ou bien en proposant des positions tirées uniformément ou selon une heuristique précise (l'heuristique de Zhou and Shen (2001) par exemple).

Dans ce chapitre, nous proposons d'étudier une problématique plus complexe que ce qui a été étudié en littérature jusqu'à présent. Il s'agit d'un problème de régression bayésienne sous contraintes de forme qui s'ajoute au problème des nœuds variables. On traitera essentiellement l'aspect pratique du problème où différentes difficultés sont à résoudre. La première difficulté consiste à spécifier judicieusement des priors pour tous les paramètres inconnus du modèle. Il est connu que la régression bayésienne peut être sensible aux choix

des priors (Kass and Raftery, 1995). La seconde difficulté est de proposer un schéma d'optimisation convenable pour calculer le mode a posteriori. Pour cela, comme les paramètres changent de dimensions, nous utilisons une nouvelle méthode plus performante que les méthodes MCMC classiques (recuit simulé, algorithme génétique, etc) pour résoudre le problème. La troisième difficulté concerne les simulations suivant la loi a posteriori. En effet, nous proposons de simuler suivant la loi a posteriori par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles couplé à l'échantillonneur de Gibbs. Le calcul de la probabilité d'acceptation/rejet de cet algorithme exige le calcul d'un rapport de deux priors sur les coefficients de la régression. Pour introduire les contraintes de forme, la densité du prior des coefficients est tronquée à un ensemble quelconque et ainsi, connue uniquement à une constante près. Pour simuler suivant la loi a posteriori, on a besoins de calculer le rapport de prior sur les coefficients ce qui revient à calculer le rapport de deux densités tronquées de dimensions différentes et connues explicitement à deux constantes multiplicatives près.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans une première partie, nous présentons l'inférence bayésienne sous contraintes en donnant le modèle complet et le posterior. Dans cette perspective, après avoir dérivé la densité a posteriori, nous expliquons le schéma des simulations suivant la loi a posteriori. Nous expliquons également comment on peut varier la configuration des nœuds en nombre et en position grâce à un modèle Multinomial-Dirichlet. Dans une deuxième partie, nous abordons le calcul de l'estimateur bayésien sous contraintes grâce à un algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo. Enfin, nous présentons les résultats numériques de notre approche et notons une amélioration des performances prédictives par rapport à d'autres méthodes.

5.2 Inférence bayésienne sous contraintes

5.2.1 Le modèle complet et le posterior

Nous rappelons que le modèle (5.1) s'écrit matriciellement $\mathbf{y} = B\beta + \varepsilon$, où on note par B une matrice $n \times (\kappa + k)$ qui désigne la base de B-spline, $K = (\kappa + k)$ avec $0 \leq \kappa \leq n$, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_K)'$ et $\varepsilon \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 \mathbb{I}_n)$. On désigne par $(\beta, \sigma^2, \mathbf{t}, \kappa)$ les paramètres inconnus et à estimer dans le modèle avec κ nœuds. Soit les nœuds $a = t_0 < t_1 < \dots < t_\kappa < t_{\kappa+1} = b$. La vraisemblance des données $\mathbf{y} = (y_j)_{j=1}^n$ s'écrit de la manière suivante :

$$p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2, \mathbf{t}, \kappa) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - B\beta)' (\mathbf{y} - B\beta) \right\}, \quad (5.2)$$

où p est notation générique d'une densité de probabilité quelconque. Pour donner les lois a priori sur $(\beta, \sigma^2, \mathbf{t}, \kappa)$, nous reprenons à nouveau les contraintes de forme spécifiées au chapitre 3. Soit S l'ensemble des vecteurs $\beta = (\beta_i)_{i=1}^K$ tels que f respecte la contrainte de forme. Par exemple, d'après la proposition 2.5.3, si on impose à f d'être croissante, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_K\},$$

pour une régression unimodale concave, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 < \beta_2, \beta_{K-1} > \beta_K, \beta_i - 2\beta_{i-1} + \beta_{i-2} \leq 0\},$$

et pour une régression unimodale, on a :

$$S = \{f \mid \beta_i \in \mathbb{R}, \beta_1 = \beta_2 < \beta_3 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_{K-1} > \beta_K, \text{ pour } l = 4, \dots, K-1\}.$$

Dans la contrainte de l'unimodalité, on restreint l à l'ensemble $\{4, \dots, K-1\}$ pour contrôler la pente de la courbe au début où $\beta_1 = \beta_2 < \beta_3$ et à la fin où $\beta_{K-1} > \beta_K$. Les distributions a priori sur $(\beta, \sigma^2, \mathbf{t}, \kappa)$ seront spécifiées comme suit. On suppose que β et σ^2 sont a priori dépendants et que l'espérance a priori des coefficients est $\mathbf{m} = (0, \dots, 0)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta \mid \sigma^2 \sim \mathcal{N}_K^S(\mathbf{m}, \sigma^2 \mathbf{V}) \text{ de densité proportionnelle à } \frac{(2\pi\sigma^2)^{K/2}}{|\mathbf{V}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{\beta' \mathbf{V}^{-1} \beta}{2\sigma^2}\right\} \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}; \\ \sigma^2 \sim \mathcal{IG}(\xi, \varsigma) \text{ de densité égale à } \frac{\varsigma^\xi}{\Gamma(\xi)} (\sigma^2)^{\xi+1} \exp\left\{-\frac{\varsigma}{\sigma^2}\right\}; \\ \mathbf{u} \mid \kappa \sim \mathcal{D}(1, \dots, 1) \text{ de densité égale à } (\kappa - 1)!; \\ \kappa \sim \mathcal{P}(\lambda) \text{ de densité égale à } \exp(\lambda) \frac{\lambda^\kappa}{\kappa!}, \end{array} \right. \quad (5.3)$$

où \mathbf{V} est une matrice $K \times K$ qui sera définie, dans la proposition 5.2.1, en fonction des contraintes de forme imposées sur les coefficients. Le paramètre $\mathbf{u} = (u_0, \dots, u_\kappa)$ de distribution Dirichlet $\mathcal{D}(1, \dots, 1)$ est relié à la position des nœuds par la relation $u_i = (t_{i+1} - t_i)/(b - a)$ où $i = 0, \dots, \kappa$. Dans ce chapitre, nous utilisons un prior sur \mathbf{u} et pas sur \mathbf{t} pour la simple raison que \mathbf{u} est au domaine de définition de la loi Dirichlet. Évidemment, faire de l'inférence sur les nœuds \mathbf{t} revient à faire de l'inférence sur \mathbf{u} et déduire \mathbf{t} grâce à la relation bijective entre \mathbf{t} et \mathbf{u} .

La loi a priori $\pi(\beta \mid \sigma^2)$, où π est une notation générique d'une densité de probabilité a priori, sur les coefficients de régression assure que la contrainte de forme est garantie par la fonction indicatrice $\mathbf{1}_{\{\beta \in S\}}$ alors que la régularité est contrôlée par l'ordre k de la spline. En multipliant (5.2) et (5.3), nous obtenons, à une constante près, la distribution

a posteriori

$$\begin{aligned}
p(\beta, \sigma^2, \mathbf{u}, \kappa | \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{y} | \beta, \sigma^2, \mathbf{u}, \kappa) \pi(\beta | \sigma^2) \pi(\sigma^2) \pi(\mathbf{u} | \kappa) \pi(\kappa) \\
&\propto (\sigma^2)^{-(\xi^* + (K/2) + 1)} \exp\left(-\frac{(\beta - \mathbf{m}^*)' (\mathbf{V}^*)^{-1} (\beta - \mathbf{m}^*) + 2\zeta^*}{2\sigma^2}\right) \\
&\quad + \lambda + \kappa \log(\lambda) - \log(\kappa!) \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}},
\end{aligned} \tag{5.4}$$

où

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}^* &= (\mathbf{V} + B'B)^{-1} (B'\mathbf{y}); \\
\mathbf{V}^* &= (\mathbf{V} + B'B)^{-1}; \\
\xi^* &= \xi + n/2; \\
\zeta^* &= \zeta + \frac{\mathbf{y}'\mathbf{y} - (\mathbf{m}^*)' (\mathbf{V}^*)^{-1} \mathbf{m}^*}{2}.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

La loi a posteriori (5.4) résultante présente quelques hyperparamètres à régler dans le prior : à savoir ξ et ζ dans l'inverse Gamma et λ dans la loi de poisson. Tous ces hyperparamètres seront affectés à des constantes dans l'étude numérique de simulation.

5.2.2 Simulation suivant la loi a posteriori

Pour simuler suivant cette loi a posteriori (5.4) par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles couplé à l'échantillonneur de Gibbs, nous devons penser à calculer, entre autres, un rapport de prior pour les coefficients de régression qui vérifient bien entendu la contrainte de forme ($\beta \in S$).

5.2.2.1 Calcul du rapport de prior sur les coefficients

Le calcul du rapport de prior des coefficients revient à calculer le rapport de deux distributions normales tronquées à S et éventuellement de dimension différentes. Soit β^c un vecteur candidat proposé dans une itération au niveau des simulations. Pour simplifier la présentation du problème, nous supposons qu'en partant d'un vecteur β , nous insérons d coefficients pour obtenir β^c .

Proposition 5.2.1 *Sous le prior (5.3), on considère que β^c est obtenu par une simple insertion de d coefficients par rapport à β .*

(i) *Sous la contrainte de monotonie, pour une matrice $\mathbf{V}^{-1} = T'_m T_m$, on a*

$$\frac{\pi(\beta^c | \sigma^2)}{\pi(\beta | \sigma^2)} = \left(\sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^{(-d)} \frac{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \dots \leq \beta_K \leq \dots \leq \beta_{K+d}\}}}{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \dots \leq \beta_K\}}} \exp\left(\frac{\beta' (T'_m T_m) \beta - \beta^c' (T_m^c T_m^c) \beta^c}{2\sigma^2}\right),$$

où T_m est une matrice $K \times K$ telle que $T_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ et T_m^c est

une matrice $(K + d) \times (K + d)$ de la même forme que T_m .

(ii) Sous la contrainte de l'unimodalité, pour une matrice $\mathbf{V}^{-1} = T_u' T_u$, on a

$$\frac{\pi(\beta^c | \sigma^2)}{\pi(\beta | \sigma^2)} = \left(\sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)^{(-d)} \frac{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \cdots \geq \beta_{K+d}\}}}{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \cdots \geq \beta_K\}}} \exp \left(\frac{\beta'(T_u' T_u) \beta - \beta^{c'}(T_u^{c'} T_u^c) \beta^c}{2\sigma^2} \right),$$

où T_u est une matrice $K \times K$ telle que $T_u = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1 & -1 \end{pmatrix}$

et T_u^c est une matrice $(K + d) \times (K + d)$ de la même forme que T_u .

Remarque Sous contraintes de monotonie nous obtenons les coefficients par $\beta = T_m^{-1} \zeta = (\zeta_1, \zeta_1 + \zeta_2, \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3, \dots, \sum_{i=1}^K \zeta_i)'$ et sous contraintes d'unimodalité $\beta = T_u^{-1} \zeta = (\zeta_1, \zeta_1 + \zeta_2, \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3, \dots, \sum_{i=l}^l \zeta_i, \sum_{i=1}^l \zeta_i - \zeta_{l+1}, \dots, \sum_{i=l}^l \zeta_i - \sum_{i=l+1}^K \zeta_i)'$ où $\zeta \sim \mathcal{N}_K^+(0, \sigma^2 \mathbb{I}_K)$ et $\mathcal{N}_K^+(\cdot, \cdot)$ est une distribution normale tronquée aux composantes positives.

Preuve Pour des raisons de simplicité, nous posons $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_K)'$ et $\zeta_d = (\zeta_1, \dots, \zeta_{K+d})'$ deux vecteurs de distributions normales tronquées aux composantes positives ($\zeta \sim \mathcal{N}_K^+(0, \sigma^2 \mathbb{I}_K)$ et $\zeta_d \sim \mathcal{N}_{K+d}^+(0, \sigma^2 \mathbb{I}_{K+d})$). Alors, les densités de ζ et ζ_d seront données par

$$p(\zeta | \sigma^2) = C \exp \left(- \frac{\zeta' \zeta}{2\sigma^2} \right) \prod_{i=1}^K \mathbf{1}_{\{\zeta_i \geq 0\}},$$

$$p(\zeta_d | \sigma^2) = C_d \exp \left(- \frac{\zeta_d' \zeta_d}{2\sigma^2} \right) \prod_{i=1}^{K+d} \mathbf{1}_{\{\zeta_i \geq 0\}},$$

où C et C_d sont deux constantes. En notant par $\{\zeta \geq 0\} = \{\zeta_1 \geq 0, \dots, \zeta_K \geq 0\}$, la constante C_d est donnée par

$$\begin{aligned} C_d^{-1} &= \int_{\zeta_d \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta'_d \zeta_d}{2\sigma^2}\right) d\zeta_d \\ &= \int_{\zeta \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta' \zeta}{2\sigma^2}\right) d\zeta \int_{\zeta_{K+1} \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta_{K+1}^2}{2\sigma^2}\right) d\zeta_{K+1} \cdots \int_{\zeta_{K+d} \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta_{K+d}^2}{2\sigma^2}\right) d\zeta_{K+d} \\ &= C^{-1} \int_{\zeta_{K+1} \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta_{K+1}^2}{2\sigma^2}\right) d\zeta_{K+1} \cdots \int_{\zeta_{K+d} \geq 0} \exp\left(-\frac{\zeta_{K+d}^2}{2\sigma^2}\right) d\zeta_{K+d}. \end{aligned}$$

Or,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx &= \sqrt{2\pi\sigma^2} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx \\ &= \sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}}. \end{aligned}$$

Donc,

$$C_d^{-1} = C^{-1} \left(\sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^d \quad \text{et} \quad \frac{C_d^{-1}}{C^{-1}} = \left(\sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^d.$$

En utilisant le vecteur à composantes positives ζ , on pourra construire un vecteur β de distribution normale et vérifiant la contrainte de monotonie de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \beta &= \left(\zeta_1, \zeta_1 + \zeta_2, \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3, \dots, \sum_{i=1}^K \zeta_i\right)' \\ &= T_m^{-1} \zeta, \end{aligned}$$

où T_m^{-1} est une matrice $K \times K$ de la forme $T_m^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$

En inversant la matrice T_m^{-1} , on peut également exprimer ζ en fonction de β de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \zeta &= \left(\beta_1, \beta_2 - \beta_1, \beta_3 - \beta_2, \dots, \beta_K - \beta_{K-1}\right)' \\ &= T_m \beta \end{aligned}$$

où T_m est la matrice inverse de T_m^{-1} donnée par $T_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$.

La densité de probabilité de β peut se déduire de celle de ζ comme suit :

$$\begin{aligned} p(\zeta|\sigma^2)d\zeta &= p(T_m\beta|\sigma^2)\left|\frac{d\zeta}{d\beta}\right|d\beta \\ &= C\mathbf{1}_{\{T_m\beta \geq 0\}} \exp\left(-\frac{(T_m\beta)'(T_m\beta)}{2\sigma^2}\right)\left|\frac{d\zeta}{d\beta}\right|d\beta \\ &= C\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \beta_2 \leq \cdots \leq \beta_K\}} \exp\left(-\frac{\beta'(T_m'T_m)\beta}{2\sigma^2}\right)d\beta, \end{aligned}$$

où le terme Jacobien $\left|\frac{d\zeta}{d\beta}\right| = 1$. D'où le rapport des densités de β et $\beta^c = (\beta_1, \dots, \beta_{K+d})'$

$$\begin{aligned} \frac{p(\beta^c|\sigma^2)}{p(\beta|\sigma^2)} &= \frac{C_d \mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_K \leq \cdots \leq \beta_{K+d}\}} \exp\left(-\beta^c(T_m^c'T_m^c)\beta^c/(2\sigma^2)\right)}{C \mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_K\}} \exp\left(-\beta'(T_m'T_m)\beta/(2\sigma^2)\right)} \\ &= \left(\sigma\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^{(-d)} \frac{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_K \leq \cdots \leq \beta_{K+d}\}} \exp\left(-\beta^c(T_m^c'T_m^c)\beta^c/(2\sigma^2)\right)}{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \cdots \leq \beta_K\}} \exp\left(-\beta'(T_m'T_m)\beta/(2\sigma^2)\right)}. \end{aligned}$$

Si on considère une contrainte d'unimodalité, en proposant un mode au milieu de la séquence des coefficients par exemple, on pourra construire un vecteur β de distribution normale à partir de ζ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \beta &= \left(\zeta_1, \zeta_1 + \zeta_2, \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3, \dots, \sum_{i=l}^l \zeta_i, \sum_{i=1}^l \zeta_i - \zeta_{l+1}, \dots, \sum_{i=l}^l \zeta_i - \sum_{i=l+1}^K \zeta_i\right)' \\ &= T_u^{-1}\zeta, \end{aligned}$$

où T_u^{-1} est une matrice $K \times K$ de la forme $T_u^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$.

En inversant la matrice T_u^{-1} , on peut également exprimer ζ en fonction de β de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\zeta &= \left(\beta_1, \beta_2 - \beta_1, \beta_3 - \beta_2, \dots, \beta_l - \beta_{l-1}, \beta_l - \beta_{l+1}, \beta_{l+1} - \beta_{l+2}, \dots, \beta_{K-1} - \beta_K \right)' \\ &= T_u \beta\end{aligned}$$

où T_u est la matrice inverse de T_u^{-1} donnée par $T_u =$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

D'une manière similaire, on obtient la densité de probabilité de β

$$p(\zeta | \sigma^2) d\zeta = p(T_u \beta | \sigma^2) \left| \frac{d\zeta}{d\beta} \right| d\beta = C \mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_K\}} \exp \left(- \frac{(T_u \beta)' (T_u \beta)}{2\sigma^2} \right) \left| \frac{d\zeta}{d\beta} \right| d\beta$$

où le terme Jacobien vaut à cette fois $\left| \frac{d\zeta}{d\beta} \right| = |(-1)^{K-l}|$. Alors, le rapport des densités est

$$\frac{p(\beta^c | \sigma^2)}{p(\beta | \sigma^2)} = \left(\sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)^{(-d)} \frac{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_{K+d}\}} \exp \left(- \beta^{c'} (T_u^c T_u) \beta^c / (2\sigma^2) \right)}{\mathbf{1}_{\{\beta_1 \leq \dots \leq \beta_l \geq \beta_{l+1} \geq \dots \geq \beta_K\}} \exp \left(- \beta' (T_u' T_u) \beta / (2\sigma^2) \right)},$$

où T_u^c est une matrice $(K+d) \times (K+d)$ de la même forme que T_u mais en rajoutant d lignes et d colonnes de plus. \square

5.2.2.2 Le choix des nœuds

Dans notre travail, nous proposons une approche entièrement bayésienne permettant la détermination du nombre et la position des nœuds dans un modèle de régression sous contraintes de forme. Pour faire varier les nœuds, nous considérons un modèle Multinomial-Dirichlet. Ce dernier modèle a été proposé dernièrement dans Kyung et al. (2010). Afin de simplifier la modélisation, les positions des nœuds seront tirées à partir d'une collection pré-spécifiée de nœuds candidats. Cette collection de positions pour les

nœuds n'est tout simplement autre que les données $\{x_j\}_{j=1}^n$. Alors, le nombre de nœuds κ est variable sur l'ensemble $\{1, \dots, n\}$. On peut interpréter les positions des nœuds comme un problème de changement de point : avant et après chaque nœud, la courbe change de direction ou de courbure ou saute brusquement, etc (Moreno et al., 2005). L'approche bayésienne qu'on propose pour modifier le nombre et la position des nœuds repose sur l'idée suivante : on applique la statistique d'ordre pour obtenir $\mathbf{x} = (x_{(1)}, \dots, x_{(n)})'$ avec $x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}$ puis, à partir de n nœuds candidats, on sélectionne κ nœuds selon la façon qu'on décrit dans la suite. Partant initialement d'un vecteur de nœuds \mathbf{t} à modifier, pour les positions de nœuds initiales $a = t_0 < t_1 < \dots < t_\kappa < t_{\kappa+1} = b$, on pose

$$n_\ell = \sum_{j=1}^n \mathbf{1}_{\{t_\ell \leq x_{(j)} < t_{\ell+1}\}}, \quad \ell = 0, \dots, \kappa. \quad (5.6)$$

Il est clair que $\sum_{\ell=0}^{\kappa} n_\ell = n$ et que n_ℓ représente le nombre d'observations dans l'intervalle $[t_\ell, t_{\ell+1})$. Cette idée peut se voir comme une classification des $\{x_{(j)}\}_{j=1}^n$ où chaque classe est de taille $n_0, n_1, \dots, n_\kappa$. Cela signifie que la position des nœuds détermine la classification des données et la taille de chaque classe. Il est facile à ce moment de remarquer que $t_1 = x_{(n_0)}, t_2 = x_{(n_0+n_1)}, \dots, t_\kappa = x_{(\sum_{\ell=0}^{\kappa-1} n_\ell)}$. On pose $n_{\kappa+1} = \dots = n_{n-1} = 0$ et $\mathbf{n} = (n_0, \dots, n_\kappa, n_{\kappa+1}, \dots, n_{n-1})'$. On note $\mathbf{q} = (q_0, \dots, q_{n-1})$ la distribution de l'affectation d'une observation $x_{(j)}$ à une classe telle que $\Pr(t_\ell \leq x_{(j)} < t_{\ell+1}) = q_\ell$ avec $\ell = 0, \dots, n-1$. Ainsi, pour tout ℓ , $q_\ell \geq 0$ et $\sum_{\ell=0}^{n-1} q_\ell = 1$. On considère une loi de distribution multinomiale sur \mathbf{n} ($\mathbf{n} \sim Mult(n, \mathbf{q})$) :

$$p(\mathbf{n}|\mathbf{q}) = \binom{n}{n_0 \dots n_\kappa} \prod_{\ell=0}^{\kappa} q_\ell^{n_\ell} = \frac{n!}{n_0! \dots n_\kappa!} \prod_{\ell=0}^{\kappa} q_\ell^{n_\ell},$$

On rappelle la définition de la fonction Gamma

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1} \exp(-x) dx, \quad \alpha > 0,$$

et comme distribution sur \mathbf{q} nous considérons une loi de Dirichlet, sur l'ensemble $D_{n-1} = \{(q_0, \dots, q_{n-2}) \in \mathbb{R}^{n-1} : \text{pour tout } \ell = 0, \dots, n-2 \text{ on a } q_\ell \geq 0 \text{ et } \sum_{\ell=0}^{n-2} q_\ell < 1\}$, de paramètre $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1})'$, $\alpha_\ell > 0$ pour tout $\ell = 0, \dots, n-1$, et de densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^{n-1} :

$$p(\mathbf{q}) = \frac{\Gamma(\sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell)}{\prod_{\ell=0}^{n-1} \Gamma(\alpha_\ell)} \left(\prod_{\ell=0}^{n-2} q_\ell^{\alpha_\ell-1} \right) \left(1 - \sum_{\ell=0}^{n-2} q_\ell \right)^{\alpha_{n-1}-1}.$$

On note par $\mathcal{D}(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1})$ la distribution de Dirichlet ci-dessus. On précise au passage que la distribution de Dirichlet est une généralisation multidimensionnelle de la loi de beta \mathcal{B} (lorsque $n - 1 = 1$, on a $\mathcal{B}(\alpha_0, \alpha_1) = \mathcal{D}(\alpha_0, \alpha_1)$). Pour modifier les nœuds \mathbf{t} , nous utilisons la distribution de Dirichlet $\mathcal{D}(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1})$. Pour le choix du paramètre $\boldsymbol{\alpha}$, nous discutons son effet dans la suite. Soit $Y = (Y_0, \dots, Y_{n-1}) \sim \mathcal{D}(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1})$. On sait que, en posant $\boldsymbol{\alpha}_0 = \sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell$, $\mathbb{E}[Y_\ell] = \alpha_\ell / \boldsymbol{\alpha}_0$ et $\mathbb{V}[Y_\ell] = \alpha_\ell(\boldsymbol{\alpha}_0 - \alpha_\ell) / \boldsymbol{\alpha}_0^2(\boldsymbol{\alpha}_0 + 1)$. Lorsque les α_ℓ sont petits, pour tout $\ell = 0, \dots, n - 1$, on peut remarquer que la dispersion des Y_i est grande. Lorsque les α_ℓ sont grands et proches, pour tout $\ell = 0, \dots, n - 1$, on peut remarquer que la variance des Y_i est petite. On remarque dans les simulations que nous obtenons un nombre petit de nœuds générés en utilisant une distribution de Dirichlet avec α_ℓ petit, $\ell = 0, \dots, n - 1$ et quand on considère des α_ℓ grands le nombre des nœuds devient grand.

Partant de l'idée que le nombre original de nœuds est petit, nous proposons comme choix sur le paramètre $\boldsymbol{\alpha}$

$$\alpha_\ell = \frac{n_\ell + 1}{n}, \quad \text{pour } \ell = 0, \dots, n - 1. \quad (5.7)$$

Éventuellement, on peut proposer un deuxième choix $\alpha_\ell = n_\ell + 1$ pour mener une étude de simulation comparée entre les estimations obtenues par les deux choix de $\boldsymbol{\alpha}$. Dans le cas où $\alpha_\ell = n_\ell + 1$, la distribution de Dirichlet devient

$$\frac{\Gamma(\sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell)}{\prod_{\ell=0}^{n-1} \Gamma(\alpha_\ell)} \prod_{\ell=0}^{n-1} q_\ell^{\alpha_\ell - 1} = \frac{\Gamma(2n)}{n!} \binom{n}{n_0 \dots n_\kappa} \prod_{\ell=0}^{\kappa} q_\ell^{n_\ell}.$$

En considérant le modèle Multinomial-Dirichlet

$$\begin{cases} \mathbf{n} | \mathbf{q} \sim \text{Mult}(n, \mathbf{q}), \\ \mathbf{q} \sim \mathcal{D}(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1}), \end{cases} \quad (5.8)$$

la loi conditionnelle de $\mathbf{q} | \mathbf{n}$, pour le modèle (5.8), est une loi de Dirichlet de paramètre $\boldsymbol{\alpha}' = \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{n}$:

$$p(\mathbf{q} | \mathbf{n}) \propto p(\mathbf{n} | \mathbf{q}) p(\mathbf{q}) \propto \prod_{\ell=0}^{n-2} q_\ell^{n_\ell + \alpha_\ell - 1} \left(1 - \sum_{\ell=0}^{n-2} q_\ell\right)^{n_{n-1} + \alpha_{n-1} - 1}. \quad (5.9)$$

Pour changer la configuration des nœuds (en nombre et en position), nous utilisons le modèle Multinomial-Dirichlet comme suit : à partir de \mathbf{q} tiré suivant une distribution de Dirichlet, on génère suivant une multinomiale un vecteur d'indices pour les classes des

observations. Ce vecteur généré est de taille n . Une fois le vecteur d'indices simulé, on trie les indices tout en rassemblant les mêmes indices dans un groupe et en affectant à zéro les indices non tirés. Par exemple, soit un vecteur candidat $(1, 4, 5, 1, 4, 3, 1, 5, 7, 5)'$ d'indices tiré à partir d'une multinomiale avec $n = 10$. En triant ce dernier vecteur, on obtient $(1, 1, 1, 3, 4, 4, 5, 5, 5, 7)$ et on affecte à zéro les indices non tirés 2, 6, 8, 9, 10. En sommant selon les fréquences des indices, on obtient $n_0 = 3, n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 3$ et $n_4 = 1$ avec $n_0 + n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = n = 10$. Ainsi, le vecteur des nœuds contient 4 nœuds donnés par leurs positions $\mathbf{t} = (t_1 = x_{(3)}, t_2 = x_{(4)}, t_3 = x_{(6)}, t_4 = x_{(9)})'$.

5.2.2.3 Simulations par Metropolis-Hastings à sauts réversibles avec Gibbs

Nous considérons une version hybride du Metropolis-Hastings à sauts réversibles avec l'échantillonnage de Gibbs pour simuler suivant la loi a posteriori (5.4). Le schéma de simulation consiste à simuler $(\beta, \mathbf{u}, \kappa)$ par Metropolis-Hastings à sauts réversibles et la variance σ^2 par une étape de Gibbs. La loi conditionnelle complète a posteriori pour σ^2 est donnée par :

$$\sigma^2 | \beta, \mathbf{u}, \kappa, \mathbf{y} \sim \mathcal{IG}(\xi^* + K/2, (\beta - \mathbf{m}^*)' (\mathbf{V}^*)^{-1} (\beta - \mathbf{m}^*) / 2 + \varsigma^*), \quad (5.10)$$

où $\mathbf{m}^*, \mathbf{V}^*, \xi^*, \varsigma^*$ sont données par (5.5).

À l'itération η des simulations, les paramètres sont notés $(\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)$. Les paramètres candidats proposés à l'itération $\eta + 1$ seront notés $(\beta^c, \mathbf{u}^c, \kappa^c)$. Les contraintes de forme seront vérifiées à l'étape de proposition \mathcal{P}_S^η dans le Metropolis-Hastings à sauts réversibles comme décrit dans la suite. La proposition d'un vecteur de coefficients β^c s'effectue par l'insertion de d coefficients à partir de β^η ou bien par la suppression de d coefficients à partir de β^η . Pour proposer l'insertion de d coefficients, on décrit dans la suite le schéma de proposition. On rappelle qu'après l'insertion d'un nœud \bar{t} et en calculant les nouveaux coefficients grâce au résultat théorique de l'insertion des nœuds donné dans de Boor (2001)

$$\bar{\beta}_i = \begin{cases} \beta_i & \text{si } t_{i+k-1} \leq \bar{t}; \\ \omega_{i,k}(\bar{t})\beta_i + (1 - \omega_{i,k}(\bar{t}))\beta_{i-1} & \text{si } t_i < \bar{t} < t_{i+k-1}; \\ \beta_{i-1} & \text{si } \bar{t} \leq t_i, \end{cases} \quad (5.11)$$

où la fonction $\omega_{i,k}(x) = \frac{x-t_i}{t_{i+k-1}-t_i}$ si $t_i < t_{i+k-1}$ et 0 sinon. Les coefficients $\bar{\beta} = (\bar{\beta}_i)_{i=1}^{K+1}$ donnés par (5.11) ont la particularité de conserver la même spline obtenue avant l'insertion du nœud supplémentaire \bar{t} et associée au vecteur nodal $\mathbf{t} = \{t_i\}_{i=1}^\kappa$. Pour proposer

une spline légèrement modifiée à l'itération $\eta + 1$ par rapport à celle obtenue à l'itération η , nous considérons les coefficients donnés par :

$$\beta'_i = \begin{cases} \beta_i & \text{si } \bar{t}_i^* < \bar{t}_l^*; \\ \omega_{i,k}(\bar{t})\beta_i + (1 - \omega_{i,k}(\bar{t}))\beta_{i-1} & \text{si } \bar{t}_i^* = \bar{t}_l^*; \\ \beta_{i-1} & \text{si } \bar{t}_i^* > \bar{t}_l^*, \end{cases} \quad (5.12)$$

où l est l'indice du nouveau coefficient inséré qu'on détermine simplement à partir de l'indice du nouveau nœud inséré \bar{t} , $\bar{t}_i^* = (\bar{t}_{i+1} + \dots + \bar{t}_{i+k-1})/(k-1)$ et

$$(\bar{t}_{k+1}, \dots, \bar{t}_{k+\kappa+1})' = (t_1, \dots, \bar{t}, \dots, t_\kappa)' \text{ avec } \bar{t}_1 = \dots = \bar{t}_k = a \text{ et } \bar{t}_{k+\kappa+2} = \dots = \bar{t}_{2k+\kappa+1} = b.$$

Nous posons par (l_1, \dots, l_d) les indices des d coefficients qu'on propose d'insérer à l'itération $\eta+1$. Après le calcul des coefficients $\beta'_{l_1}, \dots, \beta'_{l_d}$ par (5.12), nous introduisons les contraintes de forme à cette étape de proposition comme il sera expliqué plus tard. Selon ce principe, on obtient à la fin de l'étape de proposition les coefficients

$$\beta^c = \left(\beta'_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_1}, \beta'_{l_1+1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_2}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}, \dots, \beta'_{K+d} \right)',$$

où $\tilde{\beta}_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}$ sont des propositions de coefficients qui vérifient la contrainte de forme S .

Remarque Ce schéma de proposition des coefficients $\tilde{\beta}_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}$ et globalement de β^c assure que le terme Jacobien de la transition avec insertion de d nœuds et d coefficients est égale à 1. Cela se démontre facilement en écrivant la matrice Jacobienne des dérivées partielles du vecteur $(\bar{t}_{k+1}, \dots, \dots, \bar{t}_{k+\kappa+d+1}, \beta'_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_1}, \beta'_{l_1+1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_2}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}, \dots, \beta'_{K+d})'$ par rapport au vecteur $(t_1, \dots, \bar{t}_{l_1}, \dots, \bar{t}_{l_d}, \dots, t_\kappa, \beta_1, \dots, \beta_K, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_d)'$ et en effectuant des opérations élémentaires de permutation des lignes. Les réels $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_d$ sont des perturbations aléatoires assurant que les coefficients $\tilde{\beta}_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}$ vérifient les contraintes de forme S . Les permutations des lignes dans la matrice Jacobienne permettent l'obtention d'une matrice triangulaire dont tous les éléments diagonaux valent 1.

Pour proposer la suppression de d coefficients, on détermine les coefficients à supprimer puis on les élimine de β^η . On obtient à la fin de l'étape de proposition les coefficients

$$\beta^c = \left(\beta_1, \dots, \tilde{\beta}_l, \beta_{l+1}, \dots, \beta_{K-d} \right)',$$

où $\tilde{\beta}_l$ est un coefficient qui vérifie la contrainte S . Plus précisément, pendant l'insertion, la suppression ou les deux au même temps, les contraintes de forme sont appliquées de la façon suivante : pour une contrainte quelconque S et à partir de β^η à l'itération η de l'algorithme, on propose de remplacer β^η par β^c , en insérant d coefficients, tel que :

- (i) on pose $\beta' = (\beta'_1, \dots, \beta'_{l_1}, \dots, \beta'_{l_d}, \dots, \beta'_{K+d})'$;
- (ii) $\tilde{\beta}_{l_1} \sim \mathcal{U}_{\{S(\beta', l_1) \cap [\beta'_{l_1} \pm \varepsilon']\}}$ où $S(\beta', l_1) = \{\tilde{\beta}_{l_1} : (\beta'_1, \dots, \beta'_{l_1-1}, \tilde{\beta}_{l_1}, \dots, \beta'_{K+d})' \in S\}$;
 $\tilde{\beta}_{l_2} \sim \mathcal{U}_{\{S(\beta', l_2) \cap [\beta'_{l_2} \pm \varepsilon']\}}$ où $S(\beta', l_2) = \{\tilde{\beta}_{l_2} : (\beta'_1, \dots, \beta'_{l_2-1}, \tilde{\beta}_{l_2}, \dots, \beta'_{K+d})' \in S\}$;
 \vdots
 $\tilde{\beta}_{l_d} \sim \mathcal{U}_{\{S(\beta', l_d) \cap [\beta'_{l_d} \pm \varepsilon']\}}$ où $S(\beta', l_d) = \{\tilde{\beta}_{l_d} : (\beta'_1, \dots, \beta'_{l_d-1}, \tilde{\beta}_{l_d}, \dots, \beta'_{K+d})' \in S\}$;
- (iii) $\beta^c = (\beta'_1, \dots, \tilde{\beta}_{l_1}, \dots, \tilde{\beta}_{l_2}, \dots, \tilde{\beta}_{l_d}, \dots, \beta'_{K+d})'$,

où la constante ε' permet de contrôler la variance de la proposition. La valeur initiale β^1 est choisie selon un examen visuel des données $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$.

En supprimant d coefficients, les contraintes de forme sont prises en compte comme suit :

- (i) on pose $\beta' = (\beta_1, \dots, \beta_{K-d})'$;
- (ii) $l \sim \mathcal{U}_{\{1, \dots, K-d\}}$, tirage de la composante de β' à modifier en introduisant la contrainte ;
- (iii) $\tilde{\beta}_l \sim \mathcal{U}_{\{S(\beta', l) \cap [\beta_l \pm \varepsilon']\}}$ où $S(\beta', l) = \{\tilde{\beta}_l : (\beta_1, \dots, \tilde{\beta}_l, \dots, \beta_{K-d})' \in S\}$;
- (iv) $\beta^c = (\beta_1, \dots, \beta_{l-1}, \tilde{\beta}_l, \beta_{l+1}, \dots, \beta_{K-d})'$.

La probabilité d'acceptation/rejet ρ_η des simulations par Metropolis-Hastings à sauts réversibles à l'itération η est donnée par

$$\rho_\eta = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{y}|\theta^{(\kappa^c)}, \kappa^c) \pi(\mathbf{u}^c|\kappa^c) \pi(\kappa^c) \pi(\beta^c|(\sigma^2)^{\eta+1}) p(\mathbf{n}^c|\mathbf{q}^c)p(\mathbf{q}^c)}{p(\mathbf{y}|\theta^{(\kappa)}, \kappa^\eta) \pi(\mathbf{u}^\eta|\kappa^\eta) \pi(\kappa^\eta) \pi(\beta^\eta|(\sigma^2)^{\eta+1}) p(\mathbf{n}^\eta|\mathbf{q}^\eta)p(\mathbf{q}^\eta)} \right\},$$

où le rapport de vraisemblance est donné par

$$\frac{p(\mathbf{y}|\theta^{(\kappa^c)}, \kappa^c)}{p(\mathbf{y}|\theta^{(\kappa)}, \kappa^\eta)} = \exp \left\{ \frac{(\mathbf{y} - B^\eta \beta^\eta)'(\mathbf{y} - B^\eta \beta^\eta) - (\mathbf{y} - B^c \beta^c)'(\mathbf{y} - B^c \beta^c)}{2(\sigma^2)^{\eta+1}} \right\},$$

le rapport des priors pour le nombre et la position des nœuds est donné par

$$\frac{\pi(\mathbf{u}^c|\kappa^c) \pi(\kappa^c)}{\pi(\mathbf{u}^\eta|\kappa^\eta) \pi(\kappa^\eta)} = \frac{(\kappa^c - 1)! \lambda^{\kappa^c} \kappa^\eta!}{(\kappa^\eta - 1)! \lambda^{\kappa^\eta} \kappa^c!} = \frac{\kappa^\eta}{\kappa^c} \lambda^{\kappa^c - \kappa^\eta},$$

et le rapport de proposition est donné par

$$\frac{p(\mathbf{n}^c|\mathbf{q}^c)p(\mathbf{q}^c)}{p(\mathbf{n}^\eta|\mathbf{q}^\eta)p(\mathbf{q}^\eta)} = \frac{(n_0^\eta! \cdots n_{\kappa^\eta}^\eta!) \Gamma(\sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell^c) \prod_{\ell=0}^{n-1} \Gamma(\alpha_\ell^\eta) \prod_{\ell=0}^{n-1} (q_\ell^c)^{n_\ell^c + \alpha_\ell^c - 1}}{(n_0^c! \cdots n_{\kappa^c}^c!) \Gamma(\sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell^\eta) \prod_{\ell=0}^{n-1} \Gamma(\alpha_\ell^c) \prod_{\ell=0}^{n-1} (q_\ell^\eta)^{n_\ell^\eta + \alpha_\ell^\eta - 1}}.$$

Dans l'algorithme 6, nous expliquons la mise en œuvre de ces simulations en utilisant simultanément des étapes d'échantillonneur de Gibbs et des étapes de Metropolis-Hastings à sauts réversibles.

À l'itération η , l'algorithme est à l'état $(\beta^\eta, (\sigma^2)^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)$

pour $\eta = 1, 2, \dots$ **faire**

1. Générer $(\sigma^2)^{\eta+1}$ à partir de la loi conditionnelle (5.10) sachant $(\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)$
2. Générer $\mathbf{q}^c \sim \mathcal{D}(\alpha_0^\eta, \dots, \alpha_{n-1}^\eta)$ et $\mathbf{n}^c | \mathbf{q}^c \sim Mult(n, \mathbf{q}^c)$
3. Générer $\beta^c \sim \mathcal{P}_S^\eta$ pour proposer des coefficients vérifiant la contrainte S
4. Calculer $\Delta_1 = (\mathbf{y} - B^c \beta^c)'(\mathbf{y} - B^c \beta^c) - (\mathbf{y} - B^\eta \beta^\eta)'(\mathbf{y} - B^\eta \beta^\eta)$
5. Calculer $\Delta_2 = \frac{p(\mathbf{n}^c | \mathbf{q}^c) p(\mathbf{q}^c)}{p(\mathbf{n}^\eta | \mathbf{q}^\eta) p(\mathbf{q}^\eta)} \times \frac{\pi(\beta^c | (\sigma^2)^{\eta+1})}{\pi(\beta^\eta | (\sigma^2)^\eta)}$
6. Prendre

$$\rho_\eta = \left\{ \exp \left(- \frac{\Delta_1}{2(\sigma^2)^{(\eta+1)}} \right) \times \Delta_2 \times \frac{\kappa^\eta}{\kappa^c} \lambda^{\kappa^c - \kappa^\eta} \right\} \wedge 1$$

si acceptation avec probabilité ρ_η **alors**

$$(\beta^{\eta+1}, \mathbf{u}^{\eta+1}, \kappa^{\eta+1}) = (\beta^c, \mathbf{u}^c, \kappa^c) \text{ (avec probabilité } \rho_\eta)$$

sinon

$$(\beta^{\eta+1}, \mathbf{u}^{\eta+1}, \kappa^{\eta+1}) = (\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta) \text{ (avec probabilité } 1 - \rho_\eta)$$

fin si

fin pour

ALG. 6: *Algorithme de Metropolis-Hastings à sauts réversibles avec étape de Gibbs.*

5.3 L'estimateur bayésien

Comme il s'agit d'un contexte de régression sous contrainte, nous proposons d'estimer la fonction de régression par le mode a posteriori. Le calcul du mode a posteriori nous ramène à résoudre un problème d'optimisation.

On propose dans la suite d'étudier cette optimisation grâce à un algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo (SAMC) afin de calculer le mode a posteriori. Pour spécifier les détails de l'optimisation par le SAMC, nous précisons qu'il s'agit de la maximisation de la loi a posteriori $p(\beta, \mathbf{u}, \kappa | \mathbf{y})$ pour calculer le mode a posteriori $(\beta^*, \mathbf{u}^*, \kappa^*)$.

Dans le schéma d'optimisation, nous intégrons la loi a posteriori (5.4) par rapport à la variance σ^2 pour simplifier le calcul du mode a posteriori. Cette stratégie permet de réduire le nombre de variables dans la fonction objective à optimiser et de simplifier l'étape

de proposition dans l'algorithme SAMC où seulement les nœuds (modèle Multinomial-Dirichlet) et les coefficients ($\beta \in S$) seront proposés. Nous obtenons, à une constante près, la distribution a posteriori $p(\beta, \kappa, \mathbf{u}|\mathbf{y})$:

$$\begin{aligned}
p(\beta, \kappa, \mathbf{u}|\mathbf{y}) &= \int_0^\infty p(\beta, \sigma^2, \mathbf{u}, \kappa|\mathbf{y})\pi(\sigma^2)d\sigma^2 \\
&\propto \int_0^\infty (\sigma^2)^{-(\xi^*+(K/2)+1)} \exp\left(-\frac{(\beta - \mathbf{m}^*)'(\mathbf{V}^*)^{-1}(\beta - \mathbf{m}^*) + 2\varsigma^*}{2\sigma^2}\right. \\
&\quad \left. + \lambda + \kappa \log(\lambda) - \log(\kappa)\right) \frac{\varsigma^\xi}{\Gamma(\xi)} (\sigma^2)^{\xi+1} \exp\left\{-\frac{\varsigma}{\sigma^2}\right\} \mathbf{1}_{\{\beta \in S\}} d\sigma^2 \\
&\propto \Gamma(\xi^* + (K/2) + \xi + 1) \left[\frac{1}{2}(\beta - \mathbf{m}^*)'(\mathbf{V}^*)^{-1}(\beta - \mathbf{m}^*) + \varsigma^* + \varsigma\right]^{-(\xi^*+(K/2)+\xi+1)} \\
&\quad \exp\left(\lambda + \kappa \log(\lambda) - \log(\kappa)\right).
\end{aligned}$$

La maximisation de la loi a posteriori $p(\beta, \kappa, \mathbf{u}|\mathbf{y})$ se ramène à maximiser la quantité :

$$Q(\beta, \kappa, \mathbf{u}) = \frac{\Gamma(\xi^* + (K/2) + \xi + 1) \exp\left(\lambda + \kappa \log(\lambda) - \log(\kappa)\right)}{\left[\frac{1}{2}(\beta - \mathbf{m}^*)'(\mathbf{V}^*)^{-1}(\beta - \mathbf{m}^*) + \varsigma^* + \varsigma\right]^{(\xi^*+(K/2)+\xi+1)}}, \quad (5.13)$$

où $Q(\cdot, \cdot, \cdot)$ est une fonction réelle définie sur $\mathfrak{D} = S \times \{1, \dots, n\} \times [0, 1]^{\kappa+1}$. Alors, pour calculer le mode, il suffit de trouver l'argument maximum :

$$(\beta^*, \kappa^*, \mathbf{u}^*) = \arg \max_{(\beta, \kappa, \mathbf{u}) \in \mathfrak{D}} Q(\beta, \kappa, \mathbf{u}), \quad (5.14)$$

où les coefficients β vérifient la contrainte de forme ($\beta \in S$).

5.3.1 L'approximation stochastique par Monte Carlo

Durant les dernières décennies, le recuit simulé (Kirkpatrick et al., 1983) et l'algorithme génétique (Goldberg, 1989) ont été efficacement utilisés par les auteurs pour résoudre des problèmes complexes d'optimisation. Malgré leurs succès, ces deux derniers algorithmes présentent certaines difficultés de convergence vers l'extremum global. Concernant le recuit simulé, la décroissance de son paramètre de température en fonction des itérations était la difficulté principale. Il a été démontré par Geman and Geman (1984) que la décroissance logarithmique de la température assure une convergence vers l'extremum global avec une probabilité égale à 1. En pratique, cette décroissance logarithmique s'avère

lente et coûteuse en termes d'itérations. C'est pour cette raison que les auteurs utilisent fréquemment une décroissance linéaire ou bien géométrique pour accélérer la recherche de la solution même si la convergence vers l'extremum global n'est plus garantie. En ce qui concerne l'algorithme génétique, la recherche de l'extremum global s'effectue d'une manière différente en introduisant des opérations de mutation et de croisement ("crossover"). À propos de ces opérations, une population de solutions candidates ou d'individus est générée aléatoirement et ses individus seront testés suivant leurs valeurs par la fonction de l'énergie (qui est simplement la fonction à optimiser). Les meilleurs individus subissent par la suite plusieurs mutations et croisements jusqu'à ce qu'un individu de performance satisfaisante sera trouvé. L'opération de mutation consiste à effectuer une perturbation aléatoire d'un individu. Le croisement consiste à effectuer une perturbation d'un couple d'individus sélectionné selon une certaine procédure. Sous certaines conditions, l'algorithme génétique converge asymptotiquement vers l'extremum global avec une vitesse logarithmique comme le recuit simulé (Cerf, 1994; Schmitt, 2001).

Récemment, l'algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo (SAMC) a été proposé dans la littérature (Liang et al., 2007) comme un outil d'optimisation. La caractéristique de ce nouveau algorithme est son auto-ajustement tout en évitant l'attraction intense des minima locaux. Nous proposons dans la suite une brève description du SAMC. On suppose que nous considérons la distribution de Boltzmann suivante :

$$F(x) = \frac{1}{Z} \exp\{-U(x)/\tau\}, \quad x \in \mathfrak{X}, \quad (5.15)$$

où U est une fonction à optimiser, Z est une constante de normalisation, τ est la température et l'espace \mathfrak{X} est un compact. On suppose également que l'espace \mathfrak{X} est partitionné selon la fonction de l'énergie $U(\cdot)$ en m sous-espaces disjoints qu'on note par $E_1 = \{x : U(x) \leq \mathbf{u}_1\}$, $E_2 = \{x : \mathbf{u}_1 < U(x) \leq \mathbf{u}_2\}$, \dots , $E_{m-1} = \{x : \mathbf{u}_{m-2} < U(x) \leq \mathbf{u}_{m-1}\}$ et $E_m = \{x : U(x) > \mathbf{u}_{m-1}\}$ où $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{m-1}$ sont des réels arbitrairement spécifiés. Soit $\psi(x) = \exp\{-U(x)/\tau\}$ une fonction positive définie sur \mathfrak{X} avec $0 < \int x\psi(x)dx < \infty$ et $g_i = \int_{E_i} \psi(x)dx$. Un sous-espace est vide lorsque $g_i = \int_{E_i} \psi(x)dx = 0$. On pose $\hat{g}_i^{(\eta)}$ un estimateur de g_i à l'itération η et $\theta_i^\eta = \log(\hat{g}_i^{(\eta)})$ avec $\theta^\eta = (\theta_1^\eta, \dots, \theta_m^\eta)$. On considère une distribution de proposition $q(x, y)$. Pour tout $x \in \mathfrak{X}$, il existe ε_1 et ε_2 tels que

$$|x - y| \leq \varepsilon_1 \implies q(x, y) \geq \varepsilon_2. \quad (5.16)$$

Dans la pratique, ce type de distribution de proposition peut être spécifié sans grand difficulté dans le cas discret ou continu (Robert and Tweedie, 1996). Par exemple, pour

un système continu, $q(x, y)$ peut être une marche aléatoire gaussienne $y \sim \mathcal{N}(x, v\mathbb{I})$ où v sera calibré pour obtenir un taux d'acceptation/rejet désiré. Soient $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_m)$, tel que $0 < \pi_i < 1$ et $\sum_{i=1}^m \pi_i = 1$, $e^{(\eta+1)} = (e_1^{(\eta+1)}, \dots, e_m^{(\eta+1)})$ avec $e_i^{(\eta+1)} = 1$ si $x^{(\eta)} \in E_i$ et 0 sinon. On considère aussi une séquence $\{\gamma_\eta\}$ positive et croissante qui vérifie

$$(i) \sum_{\eta=1}^{\infty} \gamma_\eta = \infty \quad (ii) \sum_{\eta=1}^{\infty} \gamma_\eta^{\delta_1} < \infty, \quad (5.17)$$

où $\delta_1 \in (1, 2)$. Dans ce chapitre, on pose

$$\gamma_\eta = \left(\frac{\eta_0}{\max(\eta_0, \eta)} \right)^{\delta_2}, \quad (5.18)$$

où $\delta_2 \in (\frac{1}{2}, 1]$ et η_0 est choisi arbitrairement. Soit $J(x)$ une notation pour désigner l'indice du sous-espace E_i auquel appartient x . Les détails de l'optimisation par SAMC sont donnés dans l'algorithme 7.

À l'itération η , l'algorithme est à l'état $x^{(\eta)}$

pour $\eta = 1, 2, \dots$ **faire**

1. Générer $y \sim q(x^{(\eta)}, y)$
2. Calculer la probabilité d'acceptation/rejet

$$r_\eta = \left\{ \exp \left(\theta_{J(x^{(\eta)})}^\eta - \theta_{J(y)}^\eta \right) \frac{\psi(y) q(y, x^{(\eta)})}{\psi(x^{(\eta)}) q(x^{(\eta)}, y)} \right\} \wedge 1$$

si acceptation avec probabilité r_η **alors**

$$x^{(\eta+1)} \leftarrow y \text{ (avec probabilité } r_\eta \text{)}$$

sinon

$$x^{(\eta+1)} \leftarrow x^{(\eta)} \text{ (avec probabilité } 1 - r_\eta \text{)}$$

fin si

3. On pose $\theta^{\eta+1} = \theta^\eta + \gamma_\eta(e^{(\eta+1)} - \boldsymbol{\pi})$.

fin pour

ALG. 7: L'algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo.

On précise que l'algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo présente un mécanisme d'auto-ajustement dans l'optimisation. Si une proposition $y \sim q(x^{(\eta)}, y)$

vient d'être rejetée, le poids de la région de l'état courant $x^{(\eta)}$ sera ajusté à une valeur plus grande ce qui augmente la probabilité d'acceptation dans une prochaine itération. Ce mécanisme permet à l'algorithme d'éviter l'attraction des minima locaux. On note également au passage qu'une large valeur de η_0 permet de visiter tous les sous-espaces E_i rapidement.

Les conditions (5.17) sont naturellement utilisées dans l'approximation stochastique (Moyeed and Baddeley, 1991). La première condition (i) est nécessaire pour la convergence de θ^η . Si $\sum_{\eta=1}^{\infty} \gamma_\eta < \infty$, alors, d'après l'étape 3 dans l'algorithme (7), on peut remarquer que $\sum_{\eta=1}^{\infty} |\theta_i^{\eta+1} - \theta_i^\eta| \leq \sum_{\eta=1}^{\infty} \gamma_\eta |e_i^{(\eta+1)} - \pi_i| \leq \sum_{\eta=1}^{\infty} \gamma_\eta < \infty$ où la seconde inégalité provient du fait que $0 \leq e_i^{(\eta)}, \pi_i \leq 1$. Ainsi, la valeur de θ_i^η n'estime pas convenablement $\log(g_i)$ lorsque la valeur initiale θ_i^0 est suffisamment loin de $\log(g_i)$. La seconde condition (ii) amortit asymptotiquement l'effet de l'erreur aléatoire introduit par $e^{(\eta)}$. Elle assure que $\gamma_\eta |e_i^{(\eta+1)} - \pi_i| \leq \gamma_\eta \rightarrow 0$ quand $\eta \rightarrow \infty$.

5.3.2 Exemple

Nous proposons un exemple de fonction à plusieurs minima locaux pour illustrer l'optimisation en utilisant l'algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo. Nous considérons la fonction $U(x) = -\{\mathbf{x}_1 \sin(20\mathbf{x}_2) + \mathbf{x}_2 \sin(20\mathbf{x}_1)\}^2 \cosh\{\sin(10\mathbf{x}_1)\mathbf{x}_1\} - \{\mathbf{x}_1 \cos(20\mathbf{x}_2) + \mathbf{x}_2 \sin(20\mathbf{x}_1)\}^2 \cosh\{\cos(10\mathbf{x}_2)\mathbf{x}_2\}$ où $x = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \in [-1.1, 1.1]^2$. Cet exemple est modifié à partir de l'exemple 5.3 dans Robert and Casella (2004).

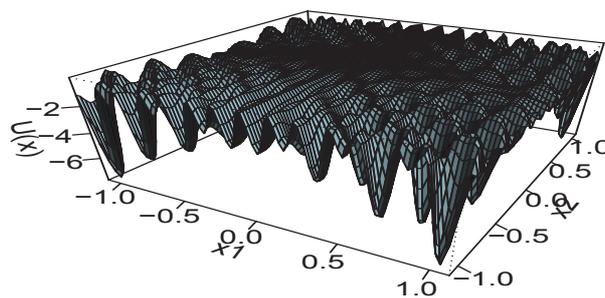


Figure 5.1 – Représentation graphique de la fonction $U(x)$ sur $[-1.1, 1.1]^2$. Liang et al. (2007) ont proposé un exemple proche de la fonction U .

La figure 5.1 représente une fonction $U(x)$ à plusieurs minima locaux séparés par des barrières avec des énergies élevées. Le minimum global est -5.73894 obtenu en $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (-1.0445, -1.0084)$ et $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (1.0445, -1.0084)$. L'espace $\mathfrak{X} = [-1.1, 1.1]^2$ est partitionné en 29 sous-espaces suivant la fonction d'énergie : $E_1 = \{x \in \mathfrak{X} : U(x) \leq -5.6\}$, $E_2 = \{x \in \mathfrak{X} : -5.6 < U(x) \leq -5.4\}$, \dots , $E_{28} = \{x \in \mathfrak{X} : -0.4 < U(x) \leq -0.2\}$ et $E_{29} = \{x \in \mathfrak{X} : -0.2 < U(x) \leq 0\}$. On pose $\psi(x) = \exp\{-U(x)\}$, $\eta_0 = 100$, $\pi_1 = \dots = \pi_{29} = 1/29$ et on choisit comme distribution de proposition une marche aléatoire gaussienne $\mathcal{N}_2(x, 0.22^2 \mathbb{I}_2)$.

5.3.3 Calcul du mode a posteriori sous contraintes

Pour calculer le mode a posteriori (MAP) sous contraintes de forme, nous intéressons dans la suite à spécifier un algorithme de type SAMC (voir algorithme 8) dont l'étape de proposition garantie l'introduction des contraintes. On considère la maximisation de la fonction Q donnée par (5.13) où les variables sont $(\beta, \mathbf{u}, \kappa) \in \mathfrak{D}$.

À l'itération η , l'algorithme est à l'état $(\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)$

pour $\eta = 1, 2, \dots$ **faire**

1. Générer $\mathbf{q}^c \sim \mathcal{D}(\alpha_0^\eta, \dots, \alpha_{n-1}^\eta)$ et $\mathbf{n}^c | \mathbf{q}^c \sim \text{Mult}(n, \mathbf{q}^c)$
2. Générer $\beta^c \sim \mathcal{P}_S^\eta$ pour proposer des coefficients vérifiant la contrainte S
3. Calculer la probabilité d'acceptation/rejet

$$r_\eta = \left\{ \exp \left(\theta_{J(\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)}^\eta - \theta_{J(\beta^c, \mathbf{u}^c, \kappa^c)}^\eta \right) \frac{\psi(\beta^c, \mathbf{u}^c, \kappa^c)}{\psi(\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta)} \frac{p(\mathbf{n}^c | \mathbf{q}^c) p(\mathbf{q}^c)}{p(\mathbf{n}^\eta | \mathbf{q}^\eta) p(\mathbf{q}^\eta)} \right\} \wedge 1$$

si acceptation avec probabilité r_η **alors**

$$(\beta^{\eta+1}, \mathbf{u}^{\eta+1}, \kappa^{\eta+1}) \leftarrow (\beta^c, \mathbf{u}^c, \kappa^c) \text{ (avec probabilité } r_\eta)$$

sinon

$$(\beta^{\eta+1}, \mathbf{u}^{\eta+1}, \kappa^{\eta+1}) \leftarrow (\beta^\eta, \mathbf{u}^\eta, \kappa^\eta) \text{ (avec probabilité } 1 - r_\eta)$$

fin si

4. On pose $\theta^{\eta+1} = \theta^\eta + \gamma_\eta (e^{\eta+1} - \boldsymbol{\pi})$.

fin pour

ALG. 8: L'optimisation de Q par un algorithme de type SAMC.

Dans l'algorithme 8, l'espace \mathfrak{D} est partitionné en m sous-espaces E_1, \dots, E_m suivant la fonction d'énergie Q et les données $\{x_j, y_j\}_{j=1}^n$. On pose $\psi(\beta, \mathbf{u}, \kappa) = \exp\{-Q(\beta, \mathbf{u}, \kappa)\}$, $\eta_0 = 2m$ et $\pi_1 = \dots = \pi_m = 1/m$. Nous considérons la même distribution de proposition \mathcal{P}_S^η pour les coefficients de régression et le même modèle Multinomial-Dirichlet pour varier les nœuds que ceux utilisés dans l'algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles.

5.4 Étude de simulation

Nous proposons d'explorer les performances numériques de la méthode bayésienne présentée dans ce chapitre. On note que pour estimer une fonction de régression sous contrainte de monotonie, l'espérance a posteriori s'avère un estimateur raisonnable. En effet, la monotonie et la concavité (convexité) sont préservées par toutes combinaisons linéaires avec des coefficients non négatives. Pour l'unimodalité et d'autres contraintes de forme plus compliquées, il sera plus approprié d'estimer f par le mode posteriori. Dans cette étude de simulation, l'espérance a posteriori est calculé par

$$\begin{cases} \hat{f}(x) = \frac{1}{Niter} \sum_{\eta=1}^{Niter} f_{\beta^{(\eta)}}(x) \\ f_{\beta^{(\eta)}}(x) = \sum_{i=1}^K \beta_i^{(\eta)} B_{i,k}(x), \end{cases} \quad (5.19)$$

où $Niter$ est un nombre large et $\beta^{(1)}, \beta^{(2)}, \dots, \beta^{(Niter)}$ sont des coefficients choisis arbitrairement à partir des simulations suivant la distribution a posteriori par le Metropolis-Hastings à sauts réversibles. D'une manière similaire, on note par $\tilde{f}(x) = \sum_{i=1}^K \beta_i^* B_{i,k}(x)$ le mode posteriori. Les performances de \hat{f} et \tilde{f} seront évaluées par la norme L_1 , la norme sup et le risque quadratique (MSE) de $|\hat{f} - f|$ et $|\tilde{f} - f|$.

L'étude numérique de simulation proposée dans cette section contient une comparaison entre le choix des nœuds avec $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)/n$ et $\alpha_\ell = n_\ell + 1$ pour $\ell = 0, \dots, n - 1$. Pour les détails numériques, on pose $\xi = \varsigma = 0.01$, $\lambda = 5$, $n = 120$, x_1, \dots, x_{120} sont des données iid tirées à partir de la loi Uniforme(0,1), et $\sigma = 0.1$ dans la génération des données $\{y_j\}_{j=1}^{120}$. Dans l'inférence, σ sera considéré comme un paramètre inconnu et sera estimé par un échantillonneur de Gibbs.

5.4.1 La régression sous contrainte de monotonie

L'étude de simulation comparée entre les deux choix des nœuds présente des performances numériques meilleurs lorsque le nombre des nœuds est relativement petit : $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)/n$.

On présente les résultats des simulations de deux fonctions monotones définies par

$$f_1(x) = \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right) \quad \text{et} \quad f_2(x) = \begin{cases} 2x & \text{si } x \in [0, 0.25], \\ 0.5 & \text{si } x \in [0.25, 0.75], \\ 2x - 1 & \text{si } x \in [0.75, 1]. \end{cases}$$

Nous itérons les deux algorithmes 8 et 6 avec 100000 itérations pour estimer f_1 et f_2 et simuler suivant leurs distributions a posteriori. Après une période initiale qui précède la convergence de 6000 itérations pour l'algorithme 8 et 10000 itérations pour l'algorithme 6, nous utilisons les 90000 itérations restantes des simulations par le Metropolis-Hastings à sauts réversibles pour calculer les moyennes empiriques \hat{f}_1 et \hat{f}_2 . Partant des données générées $\{x_i, y_i | i = 1, \dots, 120\}$, on répète les simulations cinquante fois. Les résultats des 50 expériences de simulations par l'algorithme 6 et 8 sont évalués par la moyenne de 50 normes L_1 , la moyenne de 50 normes sup et la moyenne de 50 erreurs quadratiques (MSE) pour $|\hat{f} - f|$ et $|\tilde{f} - f|$. Ces résultats sont donnés dans les tableaux 1 et 2 suivants :

Tableau 1

Résultats de l'étude de simulation pour $f_1(x) = \sin(\frac{\pi}{2}x)$.

a								
α_ℓ	Les critères		$ \hat{f} - f $	$ \tilde{f} - f $				
		norme L_1	0.0218	0.0211				
$(n_\ell + 1)/120$		norme sup	0.0630	0.0617				
		MSE	0.0053	0.0048				
		norme L_1	0.1258	0.1254				
$(n_\ell + 1)$		norme sup	0.2337	0.2329				
		MSE	0.0312	0.0315				
b								
α_ℓ	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori
$(n_\ell + 1)/120$	1	0.0000	6	0.0737	11	0.0984	16	0.0287
	2	0.0107	7	0.0899	12	0.0852	17	0.0104
	3	0.0278	8	0.09918	13	0.0563	18	0.0087
	4	0.0514	9	0.1098	14	0.0419	19	0.0045
	5	0.0686	10	0.1077	15	0.0366	20	0.0021
$(n_\ell + 1)$	1	0.0004	6	0.0512	11	0.1306	16	0.1567
	2	0.0015	7	0.0798	12	0.1333	17	0.1511
	3	0.0047	8	0.1089	13	0.1391	18	0.1392
	4	0.0092	9	0.1241	14	0.1401	19	0.1231
	5	0.0249	10	0.1257	15	0.1425	20	0.1073

Tableau 2

Résultats de l'étude de simulation pour $f_2(x) = \begin{cases} 2x & \text{si } x \in [0, 0.25], \\ 0.5 & \text{si } x \in [0.25, 0.75], \\ 2x - 1 & \text{si } x \in [0.75, 1]. \end{cases}$

a								
α_ℓ	Les critères		$ \widehat{f} - f $	$ \widetilde{f} - f $				
		norme L_1	0.0426	0.0401				
$(n_\ell + 1)/120$		norme sup	0.1249	0.1223				
		MSE	0.0075	0.0060				
		norme L_1	0.1407	0.1394				
$(n_\ell + 1)$		norme sup	0.4409	0.4380				
		MSE	0.0476	0.0418				
b								
α_ℓ	κ	Probabilité	κ	Probabilité	κ	Probabilité	κ	Probabilité
		a posteriori		a posteriori		a posteriori		a posteriori
$(n_\ell + 1)/120$	1	0.0000	6	0.0270	11	0.1210	16	0.0817
	2	0.0000	7	0.0399	12	0.1847	17	0.0689
	3	0.0007	8	0.0591	13	0.1632	18	0.0282
	4	0.0009	9	0.0783	14	0.1284	19	0.0085
	5	0.0016	10	0.0994	15	0.1008	20	0.0051
$(n_\ell + 1)$	1	0.0002	6	0.0591	11	0.1316	16	0.1712
	2	0.0014	7	0.0801	12	0.1507	17	0.1765
	3	0.0058	8	0.1093	13	0.1621	18	0.1811
	4	0.0146	9	0.1211	14	0.1659	19	0.1795
	5	0.0363	10	0.1297	15	0.1697	20	0.1678

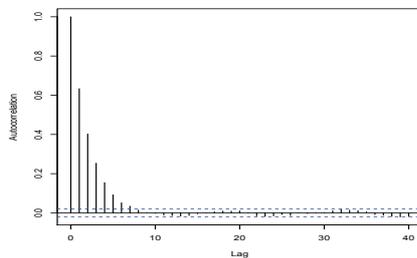
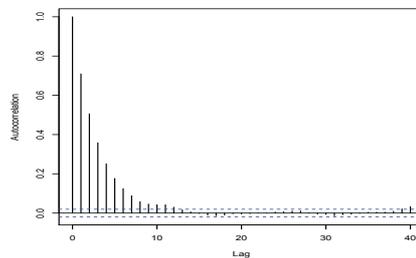
(a) $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)/n$.(b) $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)$.

Figure 5.2 – L'autocorrélation des coefficients de régression obtenus par les simulations suivant la loi a posteriori pour la fonction f_1 .

5.4.2 La régression sous contrainte d'unimodalité

On obtient la même conclusion dans l'étude de simulation sous contrainte d'unimodalité où le choix des nœuds avec $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)/n$ présente des performances numériques meilleurs que lorsque $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)$. On présente dans la suite les résultats des simulations de deux fonctions de régression unimodales définies par

$$f_3(x) = (16/9)(x - 1/2)^2 \quad \text{et} \quad f_4(x) = \begin{cases} -4x + 1 & \text{si } x \in [0, 0.25], \\ 0 & \text{si } x \in [0.25, 0.75], \\ 4x - 3 & \text{si } x \in [0.75, 1]. \end{cases}$$

Nous utilisons les deux algorithmes 8 et 6 avec les mêmes paramètres décrits dans le cadre de la contrainte de monotonie pour estimer f_3 et f_4 et simuler suivant leurs distributions a posteriori. Les résultats des simulations sont donnés dans les tableaux 3 et 4 suivants :

Tableau 3

Résultats de l'étude de simulation pour $f_3(x) = (16/9)(x - 1/2)^2$.

a								
α_ℓ	Les critères		$ \hat{f} - f $	$ \tilde{f} - f $				
$(n_\ell + 1)/120$	norme L_1		0.0166	0.0101				
	norme sup		0.0489	0.0413				
	MSE		0.0019	0.0006				
$(n_\ell + 1)$	norme L_1		0.1317	0.1285				
	norme sup		0.4009	0.3889				
	MSE		0.0386	0.0308				
b								
α_ℓ	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori	κ	Probabilité a posteriori
$(n_\ell + 1)/120$	1	0.0000	6	0.1018	11	0.0914	16	0.0120
	2	0.0003	7	0.1109	12	0.0701	17	0.0082
	3	0.0488	8	0.1302	13	0.0424	18	0.0056
	4	0.0724	9	0.1278	14	0.0222	19	0.0055
	5	0.0901	10	0.1107	15	0.0197	20	0.0037
$(n_\ell + 1)$	1	0.0001	6	0.0945	11	0.1257	16	0.1477
	2	0.0523	7	0.1113	12	0.1281	17	0.1502
	3	0.0613	8	0.1163	13	0.1326	18	0.1483
	4	0.0690	9	0.1191	14	0.1387	19	0.1369
	5	0.0783	10	0.1246	15	0.1430	20	0.1252

Tableau 4

Résultats de l'étude de simulation pour $f_4(x) = \begin{cases} -4x + 1 & \text{si } x \in [0, 0.25], \\ 0 & \text{si } x \in [0.25, 0.75], \\ 4x - 3 & \text{si } x \in [0.75, 1]. \end{cases}$

a								
α_ℓ	Les critères		$ \widehat{f} - f $	$ \widetilde{f} - f $				
		norme L_1	0.0412	0.0381				
$(n_\ell + 1)/120$		norme sup	0.1347	0.1307				
		MSE	0.0031	0.0009				
		norme L_1	0.1347	0.1306				
$(n_\ell + 1)$		norme sup	0.4701	0.4652				
		MSE	0.0366	0.0319				
b								
α_ℓ	κ	Probabilité	κ	Probabilité	κ	Probabilité	κ	Probabilité
		a posteriori		a posteriori		a posteriori		a posteriori
$(n_\ell + 1)/120$	1	0.0000	6	0.0007	11	0.1263	16	0.0859
	2	0.0000	7	0.0199	12	0.1581	17	0.0447
	3	0.0000	8	0.0278	13	0.1402	18	0.0275
	4	0.0000	9	0.0888	14	0.1294	19	0.0151
	5	0.0001	10	0.1026	15	0.1106	20	0.0142
$(n_\ell + 1)$	1	0.0006	6	0.0814	11	0.1316	16	0.1576
	2	0.0135	7	0.1092	12	0.1354	17	0.1641
	3	0.0187	8	0.1233	13	0.1403	18	0.1708
	4	0.0349	9	0.1247	14	0.1422	19	0.1631
	5	0.0508	10	0.1291	15	0.1514	20	0.1523

Les tableaux 1a, 2a, 3a et 4a présentent des comparaisons entre les résultats numériques de l'espérance a posteriori et le mode a posteriori pour différents critères. Les tableaux 1b, 2b, 3b et 4b présentent les probabilités a posteriori en fonctions du nombre des nœuds et le choix de α_ℓ . À partir des résultats numériques qu'on obtient de la distribution a posteriori, on remarque que le nombre de $\kappa = 20$ nœuds est suffisamment large. Les taux d'acceptation dans les simulations par le Metropolis-Hastings à sauts réversibles, en cas où $\alpha_\ell = (n_\ell + 1)/120$, pour les quatre exemples de fonctions f_1 , f_2 , f_3 et f_4 sont respectivement 0.3452 (0.4810), 0.2671 (0.3217), 0.2542 (0.3889) et 0.2368 (0.5108). La figure 5.2 de l'autocorrélation indique que les simulations par l'algorithme 6 se comportent assez bien. On obtient des figures similaires pour f_2 , f_3 et f_4 et pour cette raison elles ne sont pas présentées.

5.5 Discussion

On a proposé une méthode de régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme avec B-splines à nœuds variables. Le problème du rapport de deux distributions a priori tronquées et de dimensions différentes pour les coefficients de régression a été résolu ce qui a permis de simuler suivant la distribution a posteriori par un algorithme de type Metropolis-Hastings à sauts réversibles. Un modèle Multinomial-Dirichlet a été proposé pour faire varier la configuration nodale dans l'inférence. En particulier, les algorithmes de simulations suivant la loi a posteriori et du calcul de l'estimateur bayésien sous contraintes sont examinés en détails par une étude des performances numériques de la méthode. La mise en œuvre de la régression bayésienne sous contraintes a été présentée pour deux types de contraintes de forme : contrainte de monotonie et contrainte d'unimodalité.

Le problème majeur de la régression sous contraintes était la complexité de simuler suivant la loi a posteriori en présence d'une distribution a priori tronquée et de dimension variable. L'implémentation de la probabilité d'acceptation/rejet du Metropolis-Hastings à sauts réversibles nécessite le calcul d'un rapport de deux densités tronquées et de dimensions différentes. Dans la section 5.2.2, on a proposé une technique, sous des faibles hypothèses, permettant d'obtenir analytiquement le rapport des constantes d'intégration. Ce calcul a permis d'implémenter d'une façon originale les simulations suivant la loi a posteriori. L'étape de proposition des simulations a été conçu de manière à ce que les contraintes de forme seront prises en compte et le terme Jacobien est égale à 1. Un modèle Multinomial-Dirichlet a été adapté à cette étape de proposition afin de faire changer le nombre et la position des nœuds. Il s'est avéré que ce modèle Multinomial-Dirichlet est sensible au choix du paramètre α dans les simulations des nœuds. En effet, lorsque $\alpha_\ell = \frac{n_\ell+1}{n}$ pour $\ell = 0, \dots, n-1$, le nombre de nœuds obtenu à la convergence du Metropolis-Hastings à sauts réversibles et l'algorithme d'approximation stochastique par Monte Carlo est plus petit que celui lorsque $\alpha_\ell = n_\ell + 1$. Les performances numériques de la méthode sont meilleurs en utilisant le premier choix de α . Cela a été observé pour différents critères de risques.

L'étude théorique des algorithmes de simulations et de calcul du mode a posteriori n'a pas été discutée. Pour avancer dans cette voie, il semble qu'une étude de convergence poussée de l'approximation stochastique par Monte Carlo et le Metropolis-Hastings à sauts réversibles soit nécessaire. L'étude du comportement asymptotique de l'estimateur donné par (5.14) paraît intéressante également dans ce sens.

Bibliographie

- C. Abraham. A computation method in robust bayesian decision theory. *Elsevier*, 2007. 47
- J. P. Aubin. *Applied fonctionel analysis*. John Wiley & Sons, 1979. 81
- N. Bartoli and P. DelMoral. *Simulation et algorithmes stochastiques*. Cépaduès Edition, 2001. 43, 45, 46
- J. Besag and P. J. Green. Spatial statistics and bayesian computation. *Journal of the Royal Statistical Society*, 55 :25–37, 1993. 3
- R. Cerf. Une théorie asymptotique des algorithmes génétiques. Thèse de Doctorat à l'Université Montpellier II, 1994. 113
- J. M. Chambers. *Software for data analysis : programming with R*. Springer, 2008. 12
- I-S. Chang, L-C. Chien, C. A. Hsiung, C-C. Wen, and Y-J. Wu. Shape restricted regression with random bernstein polynomials. *Complex Datasets and Inverse Problems : Tomography, Networks and Beyond*, 54 :187–202, 2007. 26
- S. Chib and E. Grennberg. Understanding the metropolis-hastings algorithm. *The American Statistician*, 49 :327–335, 1995. 50
- G. Claeskens, T. Krivobokova, and J. D. Opsomer. Asymptotic properties of penalized spline estimators. *Biometrika*, 96 :529–544, 2009. 98
- J. Cornfield. Bayes theorem. *International Statistical Institute*, 35 :34–49, 1967. 2
- C. de Boor. B(asic)-spline basics. *Computer Aided Geometric Design (CAGD) Handbook*, 1 :1–34, 2001. 8, 9, 13, 14, 18, 19, 21, 24, 27, 28, 29, 108
- B. de Finetti. Bayesianism : its unifying role for both the foundations and applications of statistics. *International Statistical Review*, 42 :117–130, 1974. 2

- M. Delecroix and C. Thomas-Agnan. *Spline and Kernel Regression under Shape restrictions*. Jhon Wiley & Sons New-York, 2000. 5, 36
- D. Denison, B. K. Mallick, and A. F. M. Smith. Automatic bayesian curve fitting. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B*, 60 :333–350, 1998. 72, 79, 94, 98
- D. G. Denison, C. C. Holmes, B. K. Mallick, and A. F. M. Smith. *Bayesian Methods for Nonlinear Classification and Regression*. John Wiley & Sons, 2002. 42, 76, 77
- I. DiMatteo, C. R. Genovese, and R. E. Kass. Bayesian curve-fitting with free-knot splines. *Biometrika*, 88 :1055–1071, 2001. 72, 75, 79, 80, 93, 94, 98
- P. H. C. Eilers and B. D. Marx. Flexible smoothing with b-splines and penalties. *Statistical Science*, 11 :89–102, 1996. 8, 98
- J. Fan and I. Gijbels. Data-driven bandwidth selection in local polynomial fitting : Variable bandwidth and spatial adaptation. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B*, 57 :371–394, 1995. 74
- R. Shankar Gautam. Shape preservation behavior of spline curves. *arXiv*, 1 :1–54, 2007. 31
- A. E. Gelfand and L. Kuo. Nonparametric bayesian bioassay including ordered polytomous response. *Biometrika*, 78 :355–366, 1991. 5, 36
- A. E. Gelfand, A. F. M. Smith, and T. M. Lee. Bayesian analysis of constrained parameter and truncated data problems using gibbs sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 87 :523–532, 1992. 4
- S. Geman and D. Geman. Stochastic relaxation, gibbs distributions and the bayesian restoration of images. *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 6 :721–741, 1984. 3, 43, 112
- C. R. Genovese. A bayesian time-course model for functional magnetic resonance imaging data. *Journal of the American Statistical Association*, 95 :691–719, 2000. 80
- D. E. Goldberg. *Genetic algorithms in search, optimisation and machine learning*. Addison Wesley, 1989. 112
- D. J. Green and B. W. Silverman. *Nonparametric regression and generalized linear models : a roughness penalty approach*. Chapman & Hall, 1994. 8

- P. J. Green. Reversible jump markov chain monte carlo computation and bayesian model determination. *Biometrika*, 82 :711–732, 1995. 3, 72, 75, 86
- P. J. Green. *Trans-dimensional Markov chain Monte Carlo*. OUP, Oxford, 2003. 86
- L. H. Gunn and D. B. Dunson. A transformation approach for incorporating monotone or unimodal constraints. *Biostatistics*, 6 :434–449, 2005. 5, 37
- P. Gustafon. Bayesian regression modeling with interactions and smooth effects. *Journal of the American Statistical Association*, 95 :795–806, 2000. 77
- M. H. Hansen and C. Kooperberg. Spline adaptation in extended linear models. *Statistical Science*, 17 :2–51, 2002. 72
- T. J. Hastie. Pseudosplines. *Journal of the Royal Statistical Society*, 58 :379–396, 1996. 98
- W. K. Hastings. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications. *Biometrika*, 57 :97–109, 1970. 3
- C. C. Holmes and N. A. Heard. Generalized monotonic regression using random change points. *Statistics in Medecine*, 22 :623–638, 2003. 5, 36, 66
- J. G. Ibrahim and M. H. Chen. Power prior distributions for regression models. *Statistical Science*, 15 :46–60, 2000. 77
- S. Jeanson, N. Hilgert, M. Coquillard, C. Faiveley, P. Neveu, C. Abraham, V. Georgescu, P. Fourcassi, and E. Beuvier. Milk acidification by lactococcus lactis is improved by decreasing the level of dissolved oxygen rather than decreasing redox potential in the potential in the milk prior to inoculation. *International Journal of Food Microbiology*, 131 :75–81, 2009. 1, 60
- R. E. Kass and A. E. Raftery. Bayes factors. *Journal of American Statistical Association*, 90 :773–795, 1995. 99
- R. E. Kass and L. Wasserman. The selection of prior distributions by formal rules. *Journal of the American Statistical Association*, 91 :1343–1370, 1996. 77, 85
- G. Kauermann, T. Krivobokova, and L. Fahrmeir. Some asymptotic results on generalized spline smoothing. *Journal of the Royal Statistical Society*, 71 :487–503, 2009. 98

- C. Kelly and J. Rice. Monotone smoothing with application to dose response curves and the assessment of synergism. *Biometrics*, 46 :1071–1085, 1990. 98
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimisation by simulated annealing. *Science*, 220 :1464–1480, 1983. 112
- P. Kochevar. An application of multivariate b-splines to computer-aided geometric design. *Journal of mathematics*, 14 :159–175, 1974. 12
- M. Kyung. A computational bayesian method for estimating the number of knots in penalized splines. *Submitted*, 2011. 72
- M. Kyung, J. Gill, and G. Casella. Estimation in dirichlet random effects models. *The annals of statistics*, 38 :979–1009, 2010. 105
- P. J. Laurent. *Approximation et optimisation*. Hermann, Paris, 1972. 8
- M. Lavine and A. Mockus. A non parametric bayes method for isotonic regression. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 46 :235–248, 1995. 5, 36
- F. Leitenstorfer and G. Tutz. Knot selection by boosting techniques. *Computational statistics and data analysis*, 51 :4605–4621, 2007. 98
- F. Liang, C. Liu, and R. J. Carroll. Stochastic approximation in monte carlo computation. *Journal of the American Statistical Association*, 102 :305–320, 2007. 113, 115
- D. V. Lindley. Theory and practice of bayesian statistics. *The statistician*, 32 :1–11, 1983. 2
- J.S. Liu. *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*. Springer, New-York, 2001. 85
- E. Mammen. Estimating a smooth monotone regression function. *Annals of Statistics*, 19 :724–740, 1991. 36, 74
- E. Mammen and C. Thomas-Agnan. Smoothing splines and shape restrictions. *Scandinavian Journal of Statistics*, 26 :239–252, 1999. 36
- N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *Journal of chemical physics*, 21 :1087–1091, 1953. 3

- M. C. Meyer. Inference using shape-restricted regression splines. *The Annals of Applied Statistics*, 2 :1013–1033, 2008. 36, 37
- D. Mitra, F. Romeo, and A. Sangiovanni-Vincentelli. Convergence and finitime behaviour of simulated annealing. *Advance in Applied Probability*, 18 :747–771, 1986. 43
- N. Molinari. *Optimisation des Nœuds en Régression Spline : Applications aux Biostatistiques*. Mémoire de thèse, Université de Montpellier I, 2000. 66
- E. Moreno, G. Casella, and A. Garcia-Ferrer. An objective bayesian analysis of the change point problem. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 19 :191–204, 2005. 106
- R. A. Moyeed and A. J. Baddeley. Stochastic approximation of the mle for spatial point pattern. *Scandinavian journal of statistics*, 18 :39–50, 1991. 115
- H. Mukerjee. Monotone nonparametric regression. *The Annals of Statistics*, 16 :741–750, 1988. 36
- B. Neelon and D. B. Dunson. Bayesian isotonic regression and trend analysis. *Biometrics*, 60 :398–406, 2004. 5, 36
- F. O’Sullivan. A statistical perspective on iii-posed inverse problems. *Statistical Science*, 1 :502–518, 1986. 98
- R. L. Parker and J. A. Rice. Discussion of some aspects of the spline smoothing approach to non-parametric regression curve fitting by silverman. *Journal of the Royal Statistical Society*, 47 :40–42, 1985. 98
- P. Ramgopal, P. W. Laud, and A. F. M. Smith. Nonparametric bayesian bioassay with prior constraints on the shape of the potency curve. *Biometrika*, 80 :489–498, 1993. 5, 36
- J. O. Ramsay. Estimating smooth monotone functions. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B*, 60 :365–375, 1998. 36, 37
- B. D. Ripley. *Pattern recognition and neural networks*. Cambridge University Press, 1995. 8
- J.J. Risler. *Méthodes mathématiques pour la cao*, 1991. 17, 19, 21

- C. P. Robert and G. Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer, New York, 2004. 2, 43, 67, 115
- G. O. Robert and R. L. Tweedie. Geometric convergence and central limit theorems for multidimensional hastig and metropolis algorithms. *Biometrika*, 83 :95–110, 1996. 113
- G. O. Roberts and J. S. Rosenthal. Harris recurrence of metropolis-within-gibbs and trans-dimensional markov chains. *Annals of Applied Probability*, 16(4) :2123–2139, 2006. 85
- D. Ruppert. Selecting the number of knots for penelized splines. *Journal of computational and graphical statistics*, 11 :735–757, 2002. 98
- L. J. Savage. *The foundations of statistics reconsidered*. Reprinted in studied in subjective probability (1964), eds. Kyburgh, H.E., New York : Wiley, 1961. 2
- M. G. Schimek. *Smoothing and Regression : Approaches, Computation and Application*. Jhon Wiley & Sons New-York, 2000. 74
- L. M. Schmitt. Theory of genetic algorithms. *Theoretical computer science*, 1 :1–61, 2001. 113
- T. S. Shively and T. W. Sager. A bayesian approach to non-parametric monotone function estimation. *Journal of the Royal Statistical Society*, 71 :159–175, 2009. 5, 37
- A. F. M. Smith. Present position and potential developments : some personal views. bayesian statistics. *Journal of the Royal Statistical Society*, 147 :245–259, 1984. 2
- A. F. M. Smith and G. O. Roberts. Bayesian computation via the gibbs sampler and related markov chain monte carlo methods. *Journal of the Royal Statistical Society*, 55 :3–23, 1993. 3
- M. Smith and R. Kohn. Nonprametric regression using bayesian variable selection. *J. Econometrics*, 75 :317–344, 1996. 77
- C. J. Stone, M. H. Hansen, C. Kooperberg, and Y. K. Truong. Polynomial splines and their tensor products in extended linear modeling. *The annals of statistics*, 25 :689–705, 1997. 98

-
- L. Tierney. Markov chains for exploring posterior distributions. *The Annals of Statistics*, 22 :1701–1728, 1994. 3, 52
- L. Tierney and J. B. Kadane. Accurate approximations for posterior moments and marginal densities. *Journal of the American Statistical Association*, 81 :82–86, 1986. 2
- J. Vermaak, C. Andrieu, A. Doucet, and S. J. Godsill. Bayesian model selection of autoregressive processes. *CUED/F-INFENG/TR.360 Signal Processing Group. Cambridge : Cambridge University Engineering Department.*, 2000. 91
- M. Villalobos and G. Wahba. Inequality constrained multivariate smoothing splines with application to the estimation of posterior probability. *Journal of the American Statistical Association*, 82 :239–248, 1987. 36
- M. P. Wand. Smoothing and mixed models. *Computational statistics*, 18 :223–249, 2003. 98
- I. W. Wright and E. J. Wegman. Nonparametric regression under qualitative smoothness assumptions. *The Annals of Statistics*, 8 :1023–1035, 1980. 36
- S. Zhou and X. Shen. Spatially adaptative regression splines and accurate knot selection schemes. *Journal of the American Statistical Association*, 96 :247–259, 2001. 72, 76, 88, 98

Résumé

Nous étudions la régression bayésienne sous contraintes de régularité et de forme. Pour cela, on considère une base de B-spline pour obtenir une courbe lisse et nous démontrons que la forme d'une spline engendrée par une base de B-spline est contrôlée par un ensemble de points de contrôle qui ne sont pas situés sur la courbe de la spline. On propose différents types de contraintes de forme (monotonie, unimodalité, convexité, etc). Ces contraintes sont prises en compte grâce à la loi a priori. L'inférence bayésienne a permis de dériver la distribution posteriori sous forme explicite à une constante près. En utilisant un algorithme hybride de type Metropolis-Hastings avec une étape de Gibbs, on propose des simulations suivant la distribution a posteriori tronquée. Nous estimons la fonction de régression par le mode a posteriori. Un algorithme de type recuit simulé a permis de calculer le mode a posteriori. La convergence des algorithmes de simulations et du calcul de l'estimateur est prouvée. En particulier, quand les nœuds des B-splines sont variables, l'analyse bayésienne de la régression sous contrainte devient complexe. On propose des schémas de simulations originaux permettant de générer suivant la loi a posteriori lorsque la densité tronquée des coefficients de régression prend des dimensions variables.

Mots-clés : Régression bayésienne, B-spline, polygone de contrôle, contraintes de forme et de régularité, recuit simulé, Metropolis-Hastings, échantillonneur de Gibbs.

Abstract

We investigate the Bayesian regression under shape and smoothness constraints. We first elicit a Bayesian method for regression under shape restrictions and smoothness conditions. The regression function is built from B-spline basis that controls its regularity. Then we show that its shape can be controlled simply from its coefficients in the B-spline basis. This is achieved through the control polygon which definition and some properties are given in this thesis. The regression function is estimated by the posterior mode. This mode is calculated by a simulated annealing algorithm which allows to take into account the constraints of form in the proposal distribution. A credible interval is obtained from simulations using Metropolis-Hastings algorithm with the same proposal distribution as the simulated annealing algorithm. The convergence of algorithms for simulations and calculation of the estimator is proved. In particular, in the case of Bayesian regression under constraints and with free knots, Bayesian analysis becomes complex. we propose original simulation schemes which allows to simulate from the truncated posterior distribution with free dimension.

Keywords : Bayesian regression, B-spline, control polygon, shape and smoothness constraints, simulated annealing, Metropolis-Hastings, Gibbs sampler.