



HAL
open science

Inégalités d'Oracle pour l'Estimation de la Régression

Yun Cao

► **To cite this version:**

Yun Cao. Inégalités d'Oracle pour l'Estimation de la Régression. Mathématiques [math]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2008. Français. NNT: . tel-00341752

HAL Id: tel-00341752

<https://theses.hal.science/tel-00341752>

Submitted on 25 Nov 2008

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 PROVENCE
U.F.R. M.I.M.
ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE E.D. 184

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE

Spécialité: Mathématiques

par

Yun CAO

sous la direction de Yuri Golubev

Titre:

Inégalités d'Oracle pour l'Estimation de la Régression

soutenue publiquement le 3 avril 2008

JURY

Mme. Fabienne Castell	Université de Provence	<i>Examineur</i>
M. Yuri Golubev	Université de Provence	<i>Directeur</i>
M. Ion Grama	Université de Bretagne Sud	<i>Rapporteur</i>
M. Eric Matzner-Løber	Université Rennes II	<i>Rapporteur</i>
M. Etienne Pardoux	Université de Provence	<i>Examineur</i>
Mme. Dominique Picard	Université Paris 7	<i>Examineur</i>

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier mon directeur de thèse M. Yuri Golubev pour la gentillesse et la disponibilité qu'il a su témoigner tout au long de ma thèse. Ses qualités humaines font de lui quelqu'un que j'admire.

Je suis très honorée que M. Ion Grama et M. Eric Matzner-Løber aient accepté de rapporter sur ma thèse. Leurs conseils m'ont permis d'améliorer le manuscrit.

Je remercie vivement Fabienne Castell, Dominique Picard et Etienne Pardoux d'avoir accepté de participer à mon jury.

Je tiens à exprimer tout ma reconnaissance envers M. Enrique Andjel, M. Laurent Cavalier, M. Oleg Lepski et M. Etienne Pardoux pour leur excellents cours de DEA.

Je souhaite aussi remercier vivement M. David Trotman. Je n'oublierai jamais notre première rencontre à Paris. Ses conseils ont changé ma vie.

Un grand merci à Fabien Chiabrando. Quelqu'un qui a fait ses études avec moi dont l'aide m'a été extrêmement précieuse mais surtout que je considère un peu comme quelqu'un de ma famille.

Sincères remerciements aux autres membres de ma famille française : Corinne Mesle et Nidham Ali Pacha, qui m'accueillent dans leur famille depuis le début de mon aventure marseillaise, sans qui je n'aurais pas pu surmonter beaucoup de moments difficiles ; Maryse Laniel le François et Hélène Amic, merci pour la compréhension, l'affection et la tendresse qu'elles portent pour moi ; sans oublier Marylène L'Haridon, ma grande correspondante depuis presque trois ans.

Cette thèse est aussi pour moi l'occasion de remercier tous mes amis du CMI : Franck Sueur (quelqu'un qui compte beaucoup pour moi), Florian Bertrand (mon psy), Fida El Haje Hussein (pour tous les moments qu'on a passé ensemble, les bons comme les difficiles), Mahat Khelfallah (pour son soutien et sa grande philosophie de la vie), Nader et Sveta Yeganefar (pour leur simplicité), Konrad Schöbel (pour

toutes les discussions intéressantes qui me permettent de découvrir l'histoire et la culture allemande). Merci également à Pierre Derbez, Clément Marteau, Sébastien Loustau, Michael Chichignoud, Bruno Fornet, Momar Talla Diouf, Dalila Boughaci et Truc Trung Pham.

Je tiens à mentionner ma reconnaissance à Delphine Prizzon et Julien Fabre pour leur amitié et leur soutien.

Je remercie tous les personnels de l'administration du CMI : Sylvie Blanc, Roxane Bouanan, Nathalie Bonifay, Chantal Ravier, Sandrine Ifrah, Gisèle Fiol, Norbert Deleutre, Kai Poutrain, Marie-Christine Tort, Julie Raud, Jacques De Werdt, Hervé Massia, Anna Wojciechowska et Julien Viatte.

Un merci particulier à Christine Da Sylva de l'Observatoire, quelqu'un d'extraordinaire, pour sa vision de la vie et sans qui je n'aurais pas pu rester dans ce logement magnifique pendant plus de deux ans. Merci pour tout!

Toutes ces personnes fabuleuses m'ont permis de me sentir chez moi à Marseille alors que j'étais loin de mon pays.

Bien sûr, merci à ma famille et mes amis en Chine qui me soutiennent depuis toujours. En particulier à ma tante et ma petite cousine.

Table des matières

1	Introduction	7
1.1	Plan de la Thèse	18
2	On oracle inequalities related to a polynomial fitting	19
2.1	Introduction	19
2.2	Oracle inequalities	23
2.2.1	The Akaike method	23
2.2.2	Model selection approach	24
2.2.3	Convex linear combinations of projections methods	25
2.2.4	Adaptive estimation with an unknown noise variance	25
2.3	Proofs	26
2.3.1	Proof of Theorem 1 and Theorem 2	28
2.3.2	Proof of Theorem 3	31
2.3.3	Proof of Theorem 4	32
2.3.4	Proof of Theorem 5	34
2.3.5	Proof of Theorem 6	38
2.4	Simulations	39
3	On adaptive regression estimation by smoothing splines	43
3.1	Introduction and main results	43
3.2	Proofs	47
3.2.1	Preliminaries	47
3.2.2	Ordered processes and their properties	49
3.2.3	Examples of ordered processes	52
3.2.4	Proof of Theorem 7	54
3.2.5	Proof of Theorem 8	57
A	Aspects numériques des splines	61
A.1	Présentation générale de Splines	61
A.2	Spline Cubique	62
A.3	Interpolation par SCN	65

TABLE DES MATIÈRES

A.4	Lissage par SCN	67
A.4.1	Trouver les éléments diagonaux de bande matrice	70
A.4.2	Diagonales centrales de l'inversion d'une bande matrice	70
B	Base de Reinsch-Demmler	73
B.1	Solutions de l'équation différentielle	77
B.1.1	$\mathbf{m} = \mathbf{1}$	77
B.1.2	$\mathbf{m} = \mathbf{2}$	77

Chapitre 1

Introduction

Cette thèse se situe dans le domaine des statistiques non-paramétriques. En particulier, elle se focalise sur l'estimation des fonctions de régression par polynômes et par splines. Le modèle de la régression étudié dans cette thèse est le suivant. A partir des observations $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$ bruitées

$$Y_i = f(X_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.1)$$

où X_i sont des points d'observation sur $[0, 1]$ et où les bruits ϵ_i sont des variables aléatoires *i.i.d.* $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, il nous faut reconstruire la fonction inconnue $f(x)$, $x \in [0, 1]$.

Afin de mesurer la performance d'un estimateur $\hat{f}(x, \mathbf{Y})$, on utilise le risque quadratique

$$R(\hat{f}, f) = \mathbf{E} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - \hat{f}(X_i, \mathbf{Y})]^2, \quad (1.2)$$

où \mathbf{E} est l'espérance par rapport à la mesure engendrée par les observations \mathbf{Y} .

Le problème fondamental des statistiques est de trouver un estimateur qui minimise le risque (1.2). En statistique actuelle ce problème est considéré via deux approches distinctes: l'approche minimax et l'approche oracle.

L'approche minimax se base sur l'idée qu'il y a une information a priori sur f . Notamment, si f appartient à une classe de fonctions \mathcal{F} , on cherche un estimateur qui minimise l'erreur maximale

$$\hat{f}^* = \arg \min_{\hat{f}} \left\{ \sup_{f \in \mathcal{F}} R(\hat{f}, f) \right\}.$$

Il est évident que cet estimateur dépend de \mathcal{F} . Si \mathcal{F} est trop massive, par exemple, si elle contient toutes les fonctions, on obtient l'estimateur banal $\hat{f}^*(X_i) = Y_i$, $i = 1, \dots, n$. Son risque est égal à σ^2 et il ne diminue pas lorsque $n \rightarrow \infty$.

C'est pourquoi dans la statistique non-paramétrique, on suppose très souvent que la fonction à estimer est lisse. Plus généralement, on peut supposer que \mathcal{F} est un espace d'Hölder $\mathcal{H}(\beta, L)$ qui est l'ensemble de fonctions k -fois différentiables $f(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ tel que :

$$|f^{(k)}(x) - f^{(k)}(y)| \leq L|x - y|^\alpha, \quad x, y \in [0, 1],$$

où L est une constante positive et où $0 < \alpha \leq 1$. Dans ce cas, on peut bien approximer $f(z)$ dans un voisinage de x à l'aide d'un polynôme

$$f(z) \approx f(x) + \sum_{l=1}^k b_l(z - x)^l,$$

d'où l'idée de l'estimation par *polynômes locaux*

$$\hat{f}_n(x) = \arg \min_a \min_{b_1, \dots, b_k} \sum_{i=1}^n \left[Y_i - a - \sum_{l=1}^k b_l(z - x)^l \right]^2 K\left(\frac{X_i - x}{h_n}\right),$$

où $K(\cdot) \geq 0$ un noyau et $h_n > 0$ un paramètre, appelé la fenêtre.

On remarque que chaque couple (X_i, Y_i) entre dans $\hat{f}_n(x)$ avec son propre poids. Plus la distance entre X_i et x est grande, plus l'influence de l'observation Y_i sur $\hat{f}_n(x)$ sera faible. L'utilisation du noyau $K(\cdot)$ à support compact permet de sélectionner les points d'observation voisins de x et ainsi d'estimer localement la fonction $f(\cdot)$. La fenêtre h_n est un paramètre de lissage à choisir. Par exemple, si $f(\cdot)$ est constante, on choisit $h_n = \infty$ et ainsi on estime $f(x)$ à l'aide de toutes les observations. Par contre, si $f(\cdot)$ est très irrégulière, il est évident qu'il faut prendre h_n petit.

Dans le cadre de l'estimation minimax, $h_n = [\sigma^2 / (2\beta Ln)]^{1/(2\beta+1)}$ avec $\beta = k + \alpha$ car ce choix garantit la vitesse optimale de la convergence de $\hat{f}_n(x)$ vers $f(x)$ lorsque $n \rightarrow \infty$. Notamment, (voir [16])

$$\inf_{\tilde{f}} \sup_{f \in \mathcal{H}(\beta, L)} R(\tilde{f}, f) \asymp \sup_{f \in \mathcal{H}(\beta, L)} R(\hat{f}_n, f) \asymp n^{-2\beta/(2\beta+1)} \left[\frac{2\beta L}{\sigma^2} \right]^{1/(2\beta+1)}.$$

Une autre idée qui permet de construire de bons estimateurs minimaux est de supposer que \mathcal{F} est un espace de Sobolev :

$$\mathcal{F} = \mathbb{W}_2^m(L) = \left\{ f : \int_0^1 [f^{(m)}(u)]^2 du \leq L \right\}$$

Dans ce cas, on peut estimer $f(\cdot)$ à l'aide de la méthode du maximum de vraisemblance

$$\hat{f}^* = \arg \min_{f \in \mathbb{W}_2^m(L)} \|Y - f\|^2, \quad \text{où } \|z\|^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i^2.$$

Grâce à la méthode des multiplicateurs de Lagrange, le calcul de cet estimateur est équivalent au calcul de

$$\hat{f}_\alpha^* = \arg \min_f \left\{ \|Y - f\|^2 + \alpha \int_0^1 [f^{(m)}(u)]^2 du \right\}, \quad (1.3)$$

où α est le paramètre de lissage tel que

$$\int_0^1 [\hat{f}_\alpha^{*(m)}(x)]^2 dx = L.$$

Du point de vue pratique, cet estimateur est très attractif car il se calcule rapidement à l'aide de l'algorithme de Reinsch (voir l'annexe A). Notons que \hat{f}_α^* dépend de la constante L qui est rarement connue en pratique.

La deuxième approche que l'on utilise fréquemment en statistique non-paramétrique et en apprentissage automatique est l'approche oracle. L'idée consiste à trouver un estimateur qui minimise le risque $R(\hat{f}, f)$ dans une famille d'estimateurs \mathcal{M} . Notre but est de trouver un estimateur qui fonctionne presque comme l'oracle

$$\hat{f}_{or} = \arg \min_{\hat{f} \in \mathcal{M}} R(\hat{f}, f). \quad (1.4)$$

Cet estimateur est en fait un pseudo-estimateur puisque sa définition fait appel à la connaissance exacte de la fonction cible f .

Notons que \mathcal{M} joue un rôle décisif dans ce problème d'optimisation. Il est évident qu'il ne faut pas que \mathcal{M} soit trop vaste. Par exemple, si \mathcal{M} contient toutes les fonctions, on obtient immédiatement $\hat{f}_{or} = f$ que l'on ne peut utiliser puisque f est inconnue. D'autre part, \mathcal{M} ne doit pas être trop pauvre, pour que l'on puisse y trouver une approximation correcte de f . L'idée qui vient naturellement à l'esprit est de se limiter à un espace vectoriel de dimension finie, par exemple, un espace de polynômes ou de splines. L'objectif principal de cette thèse est de trouver un estimateur qui imite l'oracle \hat{f}_{or} à l'aide de l'estimation du risque sans biais (voir [24]).

L'estimation du risque sans biais est une méthode qui fonctionne sur des familles d'estimateurs linéaires, c'est-à-dire :

$$\mathcal{M} = \{\hat{\mathbf{f}}_\alpha : \hat{\mathbf{f}}_\alpha = S_\alpha \mathbf{Y}\},$$

où S_α est une $n \times n$ -matrice et $\hat{\mathbf{f}}_\alpha = (\hat{f}_\alpha(X_1), \dots, \hat{f}_\alpha(X_n))^T$. L'indice α est le paramètre de lissage générique. Par exemple, en estimation par polynômes, α est le degré de polynômes. En estimation par splines, α est le paramètre de lissage (voir (1.3)).

Le risque de $\hat{\mathbf{f}}_\alpha$ défini par (1.2) se calcule comme suit

$$\mathbf{E}\|\mathbf{f} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 = \|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2 + \frac{\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha S_\alpha^T)}{n}, \quad (1.5)$$

où $\mathbf{f} = (f(X_1), \dots, f(X_n))^T$ et où $\text{tr}(A)$ est la trace d'une matrice carrée A . Notons que le risque $\mathbf{E}\|\mathbf{f} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2$ dépend du biais $\|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2$. L'idée principale est d'estimer $\|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2$ à partir des observations \mathbf{Y} . Notons que

$$\|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2 = \mathbf{E}\|(I - S_\alpha)\mathbf{Y}\|^2 - \sigma^2 + \frac{2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha)}{n} - \frac{\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha S_\alpha^T)}{n},$$

d'où

$$\mathbf{E}\|\mathbf{f} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 = \mathbf{E}\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 + \frac{2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha)}{n} - \sigma^2.$$

Puisque l'espérance n'est pas estimable à partir des observations, la seule chose qu'on puisse faire est de prendre $\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 + 2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha)/n - \sigma^2$ comme l'estimateur du biais. Alors, notre choix de α basé sur l'estimation du risque sans biais est donné par

$$\alpha^A = \arg \min_{\alpha} \left\{ \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 + \frac{2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha)}{n} \right\}. \quad (1.6)$$

Cette méthode a été proposée par Akaike dans [1].

En pratique, le niveau du bruit σ^2 est rarement connu. Pour adapter notre méthode à ce cas, on remplace σ^2 par son estimateur

$$\hat{\sigma}^2 = \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2,$$

et on arrive à

$$\tilde{\alpha} = \arg \min_{\alpha} \left\{ \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 [1 + 2\text{tr}(S_\alpha)/n] \right\}. \quad (1.7)$$

Notons que, si $\text{tr}(S_\alpha) \ll n$, en utilisant le développement de Taylor, on obtient

$$1 + \frac{2}{n} \text{tr}(S_\alpha) \approx \left(1 - \frac{2}{n} \text{tr}(S_\alpha)\right)^{-1} \approx \left(1 - \frac{1}{n} \text{tr}(S_\alpha)\right)^{-2}.$$

Donc on peut remplacer $1 + 2\text{tr}(S_\alpha)/n$ dans (1.7) par $[1 - 2\text{tr}(S_\alpha)/n]^{-1}$ et on obtient alors

$$\alpha^B = \arg \min_{\alpha} \frac{\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2}{[1 - 2\text{tr}(S_\alpha)/n]}. \quad (1.8)$$

Finalement, en remplaçant $1 + 2\text{tr}(S_\alpha)/n$ dans (1.7) par $[1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^{-2}$, on obtient la méthode de la validation croisée généralisée *Generalized Cross Validation-GCV* (voir [14])

$$\alpha^{GCV} = \arg \min_{\alpha} \frac{\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2}{[1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^2}. \quad (1.9)$$

Afin de concrétiser l'estimation du risque sans biais, on se focalise sur deux familles : les polynômes et les splines.

Dans l'estimation par polynômes, les estimateurs se calculent comme suit

$$\hat{f}_q = \arg \min_{p \in \mathcal{P}^q} \sum_{i=1}^n [Y_i - p(X_i)]^2, \quad q = 1, \dots, n,$$

où \mathcal{P}^q est l'espace des polynômes de degré q

$$\mathcal{P}^q = \left\{ p(x) : p(x) = \sum_{k=0}^q a_k x^k, \quad a_k \in \mathbb{R}^1 \right\}.$$

Il est évident que ces estimateurs sont linéaires. Dans ce cas, si la variance de bruit σ^2 est connue, en utilisant la méthode d'Akaike [17], on obtient

$$q^A = \arg \min_q \left\{ \|Y_i - \hat{f}_q(X_i)\|^2 + \frac{2\sigma^2 q}{n} \right\}. \quad (1.10)$$

Le théorème suivant contrôle le risque de cette méthode. Soit

$$U(x) = -1 - \frac{\log(1 - 2x)}{2x}, \quad x \in (0, 0.5) \quad (1.11)$$

et $U^{-1}(\cdot)$ est la fonction réciproque de $U(\cdot)$.

Théorème 1 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et pour tout f*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^A} - f\|^2 \leq \frac{R(f)}{1 - \gamma} + \frac{2\sigma^2}{n(1 - \gamma)} \left[\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{U^{-1}(\gamma/2)} \right],$$

où $R(f) = \min_q R(\hat{f}_q, f)$ est le risque d'oracle.

Afin de mieux comprendre le sens statistique de ce résultat, on peut considérer différents cas selon la valeur de $R(f)$. Par exemple, si $R(f) \asymp \sigma^2/n$, on se trouve dans le cas de l'estimation paramétrique et avec $\gamma = 1/2$ on arrive à

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^A} - f\|^2 \leq \frac{C\sigma^2}{n},$$

où C est une constante.

Par contre, si $R(f) \gg \sigma^2/n$, on se trouve dans le cas de l'estimation non-paramétrique. On obtient alors

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^A} - f\|^2 \lesssim R(f) \left[1 + \sqrt{\frac{24\sigma^2}{nR(f)}} \right] \leq R(f)[1 + o(1)].$$

Cela veut dire que dans l'estimation non-paramétrique, on peut construire un estimateur dont le risque est très proche de celui de l'oracle. Par contre, dans l'estimation paramétrique, on ne peut pas obtenir un estimateur efficace.

Effectivement, le Théorème 1 peut être considéré comme un cas particulier des inégalités d'oracle intervenant dans la méthode de la sélection du modèle (voir [2] et [3]).

Dans l'estimation par polynômes, cette approche préconise le choix suivant d'ordre du polynôme

$$q^K = \arg \min_q \left\{ \|Y_i - \hat{f}_q(X_i)\|^2 + \frac{Kq\sigma^2}{n} \right\},$$

où $K > 1$ est une constante. Le risque de cette méthode n'est plus contrôlé par le risque d'oracle, mais par

$$R^K(f) = \min_q \left\{ \|f(X_i) - \hat{f}_q(X_i)\|^2 + \frac{(K-2)q\sigma^2}{n} \right\}.$$

Théorème 2 *Uniformément pour tout f , on a*

i) *si $K \geq 2$ et pour tout $\gamma \in (0, 0.5)$*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^K} - f\|^2 \leq \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \left[R^K(f) + \frac{(1+\gamma)\varepsilon^2}{\gamma} + \frac{2\varepsilon^2}{(1+\gamma)U^{-1}(\gamma)} \right],$$

ii) *si $1 < K < 2$ et pour tout $\gamma \in (0, K-1)$*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^K} - f\|^2 \leq \frac{1+\gamma}{K-1-\gamma} \left[R^K(f) + \frac{2(1+\gamma)\varepsilon^2}{2-K+2\gamma} + \frac{K\varepsilon^2}{(1+\gamma)U^{-1}(\gamma)} \right].$$

Notons que ces bornes supérieures ne peuvent pas être améliorées uniformément par rapport à f (voir [12]).

Dans le cas où σ^2 n'est pas connue, on analyse les méthodes suivantes

$$q^B = \arg \min_q \frac{\|Y_i - \hat{f}_q(X_i)\|^2}{[1 - 2q/n]} \tag{1.12}$$

et

$$q^C = \arg \min_q \frac{\|Y_i - \hat{f}_q(X_i)\|^2}{[1 - q/n]^2}. \quad (1.13)$$

Les risques de ces méthodes sont contrôlés par les théorèmes ci-dessous.

Théorème 3 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et pour tout f*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^B} - f\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ R(f) \left[1 + \frac{C_2 R(f)}{\sigma^2} \right] + \frac{2\sigma^2}{n\gamma} + \frac{2\sigma^2}{nU^{-1}(\gamma/2)} + \frac{\sigma^2}{n} \right\}.$$

Théorème 4 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et pour tout f*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{q^C} - f\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ R(f) \left[1 + \frac{C_2 R(f)}{\sigma^2} \right] + \frac{2\sigma^2}{n\gamma} + \frac{2\sigma^2}{nU^{-1}(\gamma/2)} + \frac{\sigma^2}{n} \right\}.$$

On voit bien que, quand σ^2 est inconnue, l'ajout du terme $1 + C_2 R(f)/\sigma^2$ est préjudiciable, mais cela ne détériore pas la performance de la méthode.

Dans cette thèse, on travaille également sur des combinaisons convexes des estimateurs par projection. Soit $S'(q_k)$ une $n \times n$ matrice de projection sur l'espace engendré par les polynômes de degré k . On définit l'ensemble des combinaisons convexes des M matrices par

$$\mathcal{T}_M = \left\{ S : S = \sum_{k=1}^M \tau_k S'(q_k), \text{ tels que } \tau_k \geq 0, \sum_{k=1}^M \tau_k = 1 \text{ et } q_k \in \{1, \dots, n\} \right\}.$$

où $S'(q_k)$ sont des $n \times n$ -matrices de projection sur l'espace engendré par les polynômes de degré q_k .

Pour estimer la fonction de régression, on utilise la famille des estimateurs linéaires $\hat{f}_S = S\mathbf{Y}$, où $S \in \mathcal{T}_M$. Dans ce cas, la méthode d'Akaike préconise le choix suivant de la matrice de lissage S

$$\hat{S} = \arg \min_{S \in \mathcal{T}_M} \left\{ \|\mathbf{Y} - S\mathbf{Y}\|^2 + \frac{2\sigma^2 \text{tr}(S)}{n} \right\}.$$

Le risque de cette méthode est contrôlé par le résultat suivant.

Théorème 5 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et pour tout f :*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{\hat{S}} - f\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ \min_{S \in \mathcal{T}_M} R(\hat{f}_S, f) + 2\sigma^2 \left[\frac{M}{\gamma} + \frac{M}{U^{-1}(\gamma/2)} \right] \right\}.$$

Pour éclaircir les constantes dans nos inégalités d'oracle, nous illustrons les Théorèmes 1, 3 et 4 par la méthode de Monte-Carlo. Notre idée principale consiste à mesurer la performance statistique de l'estimation du risque sans biais à l'aide de l'efficacité d'oracle définie par

$$e_{or}(f, \tilde{q}) = \frac{\inf_q \mathbf{E}_f \|\hat{f}_q - f\|^2}{\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{\tilde{q}} - f\|^2},$$

où \tilde{q} est une méthode du choix de q basée sur les données.

Il est évident que l'on ne peut pas calculer $e_{or}(f, \tilde{q})$ pour toutes les fonctions f . C'est pourquoi on a choisi la sous famille suivante paramétrisée par le rapport signal/bruit

$$f_a(X_i) = a \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\mu_k \pi_k(X_i)}{1 + (k/W)^m}$$

où a est le rapport signal/bruit, où μ_k sont des variables aléatoires *i.i.d.* qui prennent les valeurs -1 ou $+1$ avec la même probabilité et où $\{\pi_k\}$ est le système de polynômes orthogonaux. Le paramètre de lissage m et la fenêtre W sont fixés par $m = W = 6$.

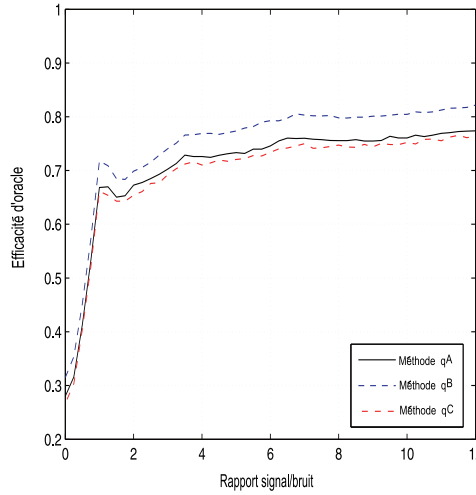


FIG. 1.1 – Efficacité d'oracle de l'estimation du risque sans biais.

La Fig. 1.1 présente l'efficacité d'oracle des méthodes q^A , q^B et q^C (voir (1.10), (1.12) et (1.13)).

On constate que la méthode d'Akaike, où la variance de bruit est connue, et celle de GCV, où la variance de bruit est inconnue, fonctionnent également bien. Le fait que la variance de bruit soit inconnue n'affecte pas l'efficacité des méthodes q^B et GCV. Dans certains cas, q^B fonctionne mieux que la méthode d'Akaike. Cela signifie

que le principe de l'estimation du risque sans biais n'est pas optimal et qu'il peut être amélioré [6].

Dans le cas de l'estimation par splines, on travaille avec la classe des estimateurs suivante

$$\mathcal{M} = \{\hat{f}_\alpha^*, \alpha \geq 0\}, \quad \text{où } \hat{f}_\alpha^* = \arg \min_f \left\{ \|Y - f\|^2 + \alpha \int_0^1 [f^{(m)}(u)]^2 du \right\}.$$

Si la variance de bruit σ^2 est connue, le paramètre de lissage α est choisi par

$$\hat{\alpha} = \arg \min_\alpha \left\{ \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 + \frac{2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha)}{n} \right\}.$$

Le théorème suivant contrôle le risque de cette méthode.

Théorème 6 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et tout f*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{\hat{\alpha}} - f\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ R(f) + \frac{C\sigma^2}{n\gamma} \right\},$$

où le risque d'oracle $R(f) = \min_{\alpha > 0} R(\hat{f}_\alpha, f)$.

Si la variance de bruit σ^2 est inconnue, le paramètre de lissage est choisi à l'aide de GCV

$$\hat{\alpha}_{GCV} = \arg \min_{\alpha : \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}} \frac{\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2}{[1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^2}. \quad (1.14)$$

Dans ce cas, le risque d'oracle est calculé par

$$\tilde{R}(f) = \inf_{\alpha : \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}} R(\hat{f}_\alpha, f).$$

Le résultat suivant contrôle la performance de GCV.

Théorème 7 *On a pour tout $\gamma \in (0,1)$ et tout f :*

$$\mathbf{E}_f \|\hat{f}_{\hat{\alpha}_{GCV}} - f\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ \left[1 - \frac{1}{\sqrt{n}} \right]^{-2} \tilde{R}(f) + \frac{C_2\sigma^2}{n\gamma} \right\}.$$

Signalons qu'il existe un algorithme très rapide qui permet de calculer $\text{tr}(S_\alpha)$ (voir l'annexe A).

En conclusion, nous expliquerons des idées principales sur lesquelles se basent nos démonstrations des inégalités d'oracle. La première étape est de transformer les données en utilisant une base orthonormée. Dans l'estimation par polynômes, c'est le système des polynômes orthogonaux $\varphi_k(\cdot)$ associé au design X_i , $i = 1, \dots, n$, c'est-à-dire

- $\varphi_k(x)$ est un polynôme de degré k ;
-

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varphi_k(X_i) \varphi_l(X_i) = \delta_{kl}, \quad (1.15)$$

où $\delta_{kl} = 1$ si $k = l$ et $\delta_{kl} = 0$ si $k \neq l$.

Dans l'estimation par splines, on utilise la base de Reinsch-Demmler définie comme suit

-

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varphi_k(X_i) \varphi_j(X_i) = \delta_{kj},$$

-

$$\int_0^1 \varphi_i^{(m)}(x) \varphi_j^{(m)}(x) dx = \lambda_i \delta_{ij}.$$

où $0 = \lambda_1 = \dots = \lambda_{m-1} < \lambda_m < \dots < \lambda_n$. Les détails techniques de cette base sont discutés dans l'annexe B.

En utilisant ces bases, on obtient la représentation équivalente des observations \mathbf{Y}

$$Z_k = \theta_k + \varepsilon \xi_k, \quad k = 1, \dots, n,$$

où

$$Z_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \varphi_k(X_i), \quad \theta_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \varphi_k(X_i),$$

ξ_k sont i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$ et $\varepsilon = \sigma/\sqrt{n}$. Notons également que l'estimateur \hat{f} admet la représentation équivalente suivante

$$\hat{\theta}_k = h_k Z_k, \quad k = 1, \dots, n,$$

où le filtre $h_k = \mathbf{1}(k \leq q)$ dans l'estimation par polynômes et où $h_k = (1 + \alpha \lambda_k)^{-1}$ dans l'estimation par splines. Pour simplifier les notations, on définit deux classes de filtres \mathcal{H}_{pol} et \mathcal{H}_{spl}

$$\mathcal{H}_{pol} = \left\{ h_k : h_k = \mathbf{1}(k \leq q), 0 < q \leq n - 1 \right\}$$

et

$$\mathcal{H}_{spl} = \left\{ h_k : h_k(\alpha) = (1 + \alpha \lambda_k)^{-1}, \quad \alpha > 0 \right\}.$$

L'idée principale est de contrôler le $\mathbf{E}_\theta \|hZ - \theta\|^2$, où h est un filtre qui dépend des données \mathbf{Z} , en se basant sur l'égalité suivante

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\theta \|hZ - \theta\|^2 &= \left\{ \mathbf{E}_\theta \|hZ - Z\|^2 + 2\varepsilon^2 \|h\|_1 - \varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \|\xi_k\|^2 \right\} \\ &\quad + 2\varepsilon \mathbf{E}_\theta \langle \theta - h\theta, \xi \rangle + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \langle h\xi, \xi \rangle - 2\varepsilon^2 \|h\|_1, \end{aligned}$$

où $\|h\|_1 = \sum_{k=0}^{n-1} h_k$. Cette égalité nous montre bien le lien existant entre le risque que l'on veut contrôler et le risque empirique. L'étape suivante est de borner $\mathbf{E}_\theta \langle \theta - h\theta, \xi \rangle$ et $\mathbf{E}_\theta \langle h\xi, \xi \rangle - \|h\|_1$ comme suit

$$\begin{aligned} |\mathbf{E}_\theta \langle \theta - h\theta, \xi \rangle| &\leq C \sqrt{\mathbf{E}_\theta \|\theta - h\theta\|^2}, \\ |\mathbf{E}_\theta \langle h\xi, \xi \rangle - \|h\|_1| &\leq C \sqrt{\mathbf{E}_\theta \|h\|^2}, \end{aligned}$$

où C est une constante.

On peut démontrer les inégalités ci-dessus à partir des résultats suivants

$$\mathbf{E} \sup_{h \in \mathcal{H}} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 \right]_+ \leq \frac{C}{\gamma} \quad (1.16)$$

et

$$\mathbf{E} \sup_{h \in \mathcal{H}} \left[\sum_{k=0}^{n-1} h_k (\xi_k^2 - 1) - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} h_k^2 \right]_+ \leq \frac{C}{\gamma}, \quad (1.17)$$

où $\gamma \geq 0$, $[x]_+ = \max\{0, x\}$, C est une constante et \mathcal{H} soit \mathcal{H}_{pol} soit \mathcal{H}_{spl} .

Afin de démontrer (1.16) dans le cas de l'estimation par polynômes ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pol}$), on utilise le fait que la distribution du processus gaussien $\tau(h) = \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k$ coïncide avec celle du processus de Wiener $W(\sum_{k=0}^{n-1} [1 - h_k]^2 \theta_k^2)$.

Dans ce cas, (1.16) est équivalente à

$$\mathbf{E} \left\{ \max_{t \geq 0} [W(t) - \gamma t] \right\} \leq \frac{1}{2\gamma}. \quad (1.18)$$

Afin de vérifier (1.17), on applique l'inégalité de Doob pour la martingale $\eta_k = \exp \left[\alpha \sum_{s=0}^{k-1} (\xi_s^2 - 1) - \alpha U(\gamma) k \right]$ et on obtient

$$\mathbf{E} \left\{ \max_k \left[\sum_{s=0}^{k-1} (\xi_s^2 - 1) - U(\gamma) k \right] \right\} \leq \frac{1}{2\gamma}. \quad (1.19)$$

Dans le cas où $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{spl}$, afin de généraliser (1.18) et (1.19), on introduit les processus ordonnés. Le processus séparable $\xi(t)$ est un processus ordonné si

•

$$\mathbf{E}\xi(t_1)\xi(t_2) \geq \min\{\mathbf{E}\xi^2(t_1), \mathbf{E}\xi^2(t_2)\};$$

• il existe $\lambda > 0$ tel que

$$\sup_{t_1, t_2} \mathbf{E} \cosh \left\{ \lambda \frac{\xi(t_1) - \xi(t_2)}{\sqrt{\mathbf{E}[\xi(t_1) - \xi(t_2)]^2}} \right\} < \infty.$$

La propriété principale des processus ordonnés est donnée par le théorème suivant.

Théorème. *Si $\xi(t)$ est un processus ordonné, alors*

$$\mathbf{E} \sup_{t \geq 0} [\xi(t) - \gamma \mathbf{E}\xi(t)^2]_+^p \leq \frac{C(p)}{\gamma^p}.$$

Ainsi, pour démontrer (1.16) et (1.17), il suffit de vérifier que les processus

$$\xi_1(h) = \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k \quad \text{et} \quad \xi_2(h) = \sum_{k=0}^{n-1} h_k (\xi_k^2 - 1), \quad h \in \mathcal{H}_{spl}$$

sont ordonnés.

1.1 Plan de la Thèse

Dans le Chapitre 2, on considère le problème d'estimation par polynômes. On étudie deux méthodes classiques: la méthode d'Akaike et la méthode GCV, afin d'effectuer le choix de degré du polynôme. On discute également de la méthode de combinaison convexe des estimateurs par projection. En conclusion, on illustre nos résultats théoriques à l'aide de la méthode de Monte-Carlo.

Le Chapitre 3 est consacré à l'estimation de la fonction de régression par splines. Le but est de bien choisir le paramètre de lissage α . On continue l'étude de la méthode d'Akaike et de la méthode GCV pour effectuer ce choix de α . On introduit la notion de processus ordonnés et à l'aide de ces processus on démontre deux inégalités d'oracle pour l'estimation par splines.

Dans l'annexe on présente des algorithmes numériques pour le calcul des splines.

Chapitre 2

On oracle inequalities related to a polynomial fitting

2.1 Introduction

The main goal in this chapter is to give an exposition of elementary methods used in the theory of oracle inequalities related to projection estimators. In order to be more precise, we consider a classical problem of polynomial fitting going back to Gauss and Legendre. The mathematical model of this problem is widely used in practice and admits a simple and transparent statistical interpretation. Suppose we are given n design points X_1, \dots, X_n in \mathbb{R}^1 and the noisy data

$$Y_i = f(X_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.1)$$

where ϵ_i are *i.i.d.* random variables with $\mathbf{E}\epsilon_i = 0$ and a finite variance $\mathbf{E}\epsilon_i^2 = \sigma^2$. The regression function $f : \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1$ is assumed to be unknown and our goal is to find, based on the data at hand $X, Y = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$, a polynomial $p_{X,Y}(x)$, which provides a good approximation of $f(x)$. Since the fitting polynomial is a random function, we measure the quality of approximation by the mean square error

$$r^n(f, p_{X,Y}) = \mathbf{E}_f d^n(f, p_{X,Y}),$$

where \mathbf{E}_f stands for the expectation with respect to the measure generated by Y_i , $i = 1, \dots, n$ and

$$d^n(f, p_{X,Y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - p_{X,Y}(X_i)]^2.$$

The traditional least squares technique, which is computationally efficient and relies on numerical linear algebra, provides a natural approach to the minimization

CHAPITRE 2. ON ORACLE INEQUALITIES RELATED TO A
POLYNOMIAL FITTING

of $r^n(f, p_{X,Y})$. From mathematical viewpoint, this technique can be described as follows. Let \mathcal{P}^q be the set of all polynomials of degree q

$$\mathcal{P}^q = \left\{ p(x) : p(x) = \sum_{k=0}^q a_k x^k, \quad a_k \in \mathbb{R}^1 \right\}.$$

Then we find a polynomial providing the best fit to the data Y within \mathcal{P}^q

$$p_{X,Y}^q(x) = \arg \min_{p \in \mathcal{P}^q} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Y_i - p(X_i)]^2.$$

The question, when and why $p_{X,Y}^q(x)$ can be viewed as a minimizer of $r^n(f, p_{X,Y})$, is at the very core of the mathematical foundations of learning theory and we refer the interested readers to [7] for detail. Once the family of fitting polynomials $p_{X,Y}^q(x)$, $q = 1, \dots, n$ has been computed, the next natural step is to determine "the best" polynomial within this family. This should be done automatically by a data-driven method based on the available data. Before discussing traditional approaches to this problem, let us make a standard linear transformation of the data Y letting to simplify numerous technical details.

Denote by $\{\pi_k(x), k = 0, 1, \dots\}$ the system of orthogonal polynomials associated with the design points $X_i, i = 1, \dots, n$:

- $\pi_k(x)$ is a polynomial of degree k
-

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \pi_k(X_i) \pi_l(X_i) = \delta_{lk},$$

where $\delta_{kl} = 1$ if $k = l$ and $\delta_{kl} = 0$ otherwise.

For simplicity, it is assumed that the design points are different, so one can construct n orthogonal polynomials. Compute the following statistics

$$Z_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \pi_k(X_i) Y_i, \quad k = 0, \dots, n-1$$

and notice that we can represent these new data as follows

$$Z_k = \theta_k + \varepsilon \xi_k, \quad k = 0, \dots, n-1, \tag{2.2}$$

where

$$\theta_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \pi_k(X_i) f(X_i), \quad \xi_k = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \pi_k(X_i) \varepsilon_i$$

and $\varepsilon = \sigma/\sqrt{n}$. Notice also that ξ_k are zero mean and uncorrelated with $\mathbf{E}\xi_k\xi_l = \delta_{kl}$. It is easy to see that the models (2.2) and (2.1) are equivalent since

$$Y_i = \sum_{k=0}^{n-1} Z_k \pi_k(X_i), \quad f(X_i) = \sum_{k=0}^{n-1} \theta_k \pi_k(X_i), \quad \epsilon_i = \sigma \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k \pi_k(X_i).$$

Thus, the problem of polynomial fitting is equivalent to estimating θ_k , $k = 0, \dots, n-1$, based on the noisy data Z_k . Notice also that the risk of the fitting is computed by

$$d^n(f, p_{X,Y}) = \frac{1}{n} \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} [\theta_k - \hat{\theta}_k]^2 = \frac{1}{n} \mathbf{E}_\theta \|\theta - \hat{\theta}\|^2,$$

where

$$\hat{\theta}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_{X,Y}(X_i) \pi_k(X_i).$$

Therefore from now on we deal with the statistical model (2.2). Moreover, in order to simplify substantially some technical details, we shall assumed that ξ_k are *i.i.d.* $\mathcal{N}(0,1)$. Our statistical analysis of this model is essentially related with a special class of estimators defined by

$$\hat{\theta}_k = h_k Z_k, \quad k = 0, \dots, n-1,$$

where the sequence $h_k \in [0,1]$ may depend on the observations. For brevity, we will denote this estimator by $\hat{\theta} = hZ$. In what follows, the sequence h is called *filter*. If h is a given filter which does not depend on the observations, then the mean square risk of the estimator $\hat{\theta} = hZ$ is computed very easily

$$R(\theta, h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_\theta \|hZ - \theta\|^2 = \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 + \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k^2.$$

In the present chapter, we concentrate on the so-called projection estimators with $h_k = \mathbf{1}(k \leq q)$. Motivation of this class is related to the fact that the least squares polynomial fitting $p_{X,Y}^q(x)$ is equivalent to the estimator $\hat{\theta}_k = \mathbf{1}(k \leq q) Z_k$. For the parameter q we use the term *bandwidth*. Denote for brevity by \mathcal{H}^m the set of all projection filters with the bandwidths less than m , i.e.

$$\mathcal{H}^m = \left\{ h_k : h_k = \mathbf{1}(k \leq q), 0 < q \leq m-1 \right\}. \quad (2.3)$$

Notice that the problem of data-driven choice of the degree of fitting polynomial can be reformulated as the data-driven choice of a filter within \mathcal{H}^n . A traditional approach to this problem is based on the principle of unbiased risk estimation (see

[24]) which has a simple heuristic motivation. If θ_k^2 were known, the best h^* would be computed as $h^* = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^n} R(\theta, h)$. Therefore the principal idea of the method is to minimize the unbiased estimate of $R(\theta, h)$. This approach, going back to [1], [18] and [22], can be easily implemented since θ_k^2 may be estimated by $Z_k^2 - \varepsilon^2$. Thus, we arrive at the famous Akaike's criterion

$$\bar{h}^A = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^n} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} [1 - h_k]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k \right\}. \quad (2.4)$$

The main goal in this chapter is to provide a panorama of oracle inequalities related to Akaike's method and its natural extensions. We begin with non-asymptotic concentration inequalities for $\|\bar{h}^A Z - \theta\|^2$ expressed in terms of the oracle risk

$$R(\theta) = R(\theta, h^*) = \inf_{h \in \mathcal{H}^n} R(\theta, h). \quad (2.5)$$

Some of these inequalities (Theorem 1) are not surprisingly new (see, for instance, [17]). However, we prove them with elementary technique based on the Doob inequality. This technique, improving the second order terms in the oracle inequalities, was firstly proposed in [12] and [13].

The second class of problem addressed here is related to the fact that the noise variance is hardly known in practice. In order to make (2.4) feasible from the practical viewpoint, one can estimate the unknown noise variance by

$$\hat{\varepsilon}^2(h) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} [1 - h_k]^2 Z_k^2$$

and plug-in this estimator in (2.4). Thus we get the following adaptive filter

$$\tilde{h} = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^n} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 Z_k^2 \left(1 + \frac{2}{n} \sum_{s=0}^{n-1} h_s \right) \right\}.$$

In the present chapter, we shall study two counterparts of \tilde{h} :

$$\bar{h}^B = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^{n/4}} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 Z_k^2 \left(1 - \frac{2}{n} \sum_{s=0}^{n-1} h_s \right)^{-1} \right\} \quad (2.6)$$

and

$$\bar{h}^C = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^{n/4}} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 Z_k^2 \left(1 - \frac{1}{n} \sum_{s=0}^{n-1} h_s \right)^{-2} \right\}. \quad (2.7)$$

We would like to draw attention on the fact that here, by some technical reasons, we use the class $\mathcal{H}^{n/4}$ which is evidently embedded in \mathcal{H}^n and we shall control the risks of $\bar{h}^B Z$ and $\bar{h}^C Z$ in terms of

$$R^+(\theta) = \min_{h \in \mathcal{H}^{n/4}} R(\theta, h). \quad (2.8)$$

From heuristic viewpoint the methods \bar{h}^B, \bar{h}^C can be viewed as approximations of \tilde{h} provided that $\sum_{k=0}^{n-1} h_k \ll n$. Indeed, in this case by the Taylor expansion

$$1 + \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} h_k \approx \left(1 - \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} h_k\right)^{-1} \approx \left(1 - \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} h_k\right)^{-2}$$

and we easily get (2.6) and (2.7).

Along with projection filters we shall deal with their convex combinations. Formally, this class of filters defined by

$$\mathcal{C}_M^m = \left\{ h : h_k = \sum_{s=1}^M \lambda_s \mathbf{1}(k \leq N_s), \lambda_s \geq 0, \sum_{s=1}^M \lambda_s = 1, N_s \in [1, m-1] \right\}.$$

Data-driven choice of filter within this class relies on the same principle of the unbiased risk estimation, and we shall provide an oracle inequality for this approach.

This chapter is organized as follows. Oracles inequalities are summarized in Section 2 and their proofs are given in Section 3. In order to illustrate numerically oracle inequalities, we provide in Section 4 some simulation results.

2.2 Oracle inequalities

2.2.1 The Akaike method

We start our series of oracle inequalities with the classical Akaike method defined by (2.4).

Theorem 1 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ and $\gamma \in (0,1)$*

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \leq \frac{R(\theta)}{1-\gamma} + \frac{2\varepsilon^2}{1-\gamma} \left[\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{U^{-1}(\gamma/2)} \right], \quad (2.9)$$

where

$$U(x) = -1 - \frac{\log(1-2x)}{2x}, \quad x \in (0, 1/2) \quad (2.10)$$

and the oracle risk $R(\theta)$ is defined by (2.5).

Statistical sense of this theorem is very transparent. Let us consider two typical situations:

- parametric estimation $R(\theta) \asymp \varepsilon^2$
- non-parametric estimation $R(\theta) \gg \varepsilon^2$.

In the first case, taking for instance $\gamma = 1/2$, we get the following upper bound

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \leq CR(\theta),$$

where C is a constant. It means that when f is a polynomial of a given small degree, we cannot mimic well the oracle risk, but the losses are not very crucial. On the other hand, in the case of non-parametric estimation, (2.9) reveals that the Akaike criterion works nice. Indeed, assuming that γ is small, we get from (2.9) and the Taylor formula

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \lesssim R(\theta) + \gamma R(\theta) + 6\gamma^{-1}\varepsilon^2$$

and minimizing the right-hand side of this inequality with respect to γ , we arrive at

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \lesssim R(\theta) \left[1 + \sqrt{\frac{24\varepsilon^2}{R(\theta)}} \right].$$

This upper bound certifies that the Akaike method mimics well the oracle risk.

While Theorem 1 provides only an upper bound for $\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2$ the next theorem controls large deviations of $\|\bar{h}^A Z - \theta\|^2$ from $R(\theta)$.

Theorem 2 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ and $\gamma \in (0,1)$*

$$\mathbf{P}_\theta \left\{ (1 - \gamma) \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 > (1 + \gamma)R(\theta) + \frac{8\varepsilon^2 x}{U^{-1}(\gamma/2)} \right\} \leq 4e^{-x}. \quad (2.11)$$

2.2.2 Model selection approach

Theorem 1 can be viewed as a special case of oracle inequalities related to model selection methods. We refer interested readers to [2] and [3] for a motivation and mathematical backgrounds of this approach. For the polynomial fitting problem, the model selection approach provides us with the following data-driven filter

$$\bar{h}^K = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^n} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} [1 - h_k]^2 Z_k^2 + K\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k \right\}, \quad (2.12)$$

where $K > 1$ is a constant. Let

$$R^K(\theta) = \min_{h \in \mathcal{H}^n} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} [1 - h_k] \theta_k^2 + (K - 1)\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k^2 \right\}. \quad (2.13)$$

Statistical properties of this approach are described by

Theorem 3 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ we have*

i) for $K \geq 2$ and for any $\alpha \in (0, 0.5)$

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^K Z - \theta\|^2 \leq \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \left[R^K(\theta) + \frac{(1+\alpha)\varepsilon^2}{\alpha} + \frac{2\varepsilon^2}{(1+\alpha)U^{-1}(\alpha)} \right]$$

ii) for $1 < K < 2$ and for any $\alpha \in (0, K-1)$

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^K Z - \theta\|^2 \leq \frac{1+\alpha}{K-1-\alpha} \left[R^K(\theta) + \frac{2(1+\alpha)\varepsilon^2}{2-K+2\alpha} + \frac{K\varepsilon^2}{(1+\alpha)U^{-1}(\alpha)} \right].$$

It can be shown that these upper bounds cannot be substantially improved uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ (see [12]).

2.2.3 Convex linear combinations of projections methods

Let

$$\bar{h}^M = \arg \min_{h \in \mathcal{C}_M^n} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1-h_k)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k \right\} \quad (2.14)$$

be the data-driven filter within the family of all linear combinations of $M \geq 2$ projection filters.

Theorem 4 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ and $\gamma \in (0,1)$*

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^M Z - \theta\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ \min_{h \in \mathcal{C}_M^n} R(\theta, h) + 2\varepsilon^2 \left[\frac{M}{\gamma} + \frac{M}{U^{-1}(\gamma/2)} \right] \right\}.$$

Notice that this upper bound is good only when the number of projection estimators involved in the convex combination is small. For the case of large M we refer the interested readers to [19].

2.2.4 Adaptive estimation with an unknown noise variance

In this section, we focus on the adaptive fitting with an unknown noise variance. As it was mentioned above, we use in this case the data-driven filters defined by (2.6)-(2.7) and our goal is to control their risks in terms of the oracle risk from (2.8).

Theorem 5 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ and $\gamma \in (0,1)$*

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - \theta\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ R^+(\theta) \left[1 + \frac{C_1 R^+(\theta)}{n\varepsilon^2} \right] + \frac{2\varepsilon^2}{\gamma} + \frac{2\varepsilon^2}{U^{-1}(\gamma/2)} + \varepsilon^2 \right\},$$

where C_1 is a constant.

Theorem 6 *Uniformly in $\theta \in \mathbb{R}^n$ and $\gamma \in (0,1)$*

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^C Z - \theta\|^2 \leq \frac{1}{1-\gamma} \left\{ R^+(\theta) \left[1 + \frac{C_2 R^+(\theta)}{n\varepsilon^2} \right] + \frac{2\varepsilon^2}{\gamma} + \frac{2\varepsilon^2}{U^{-1}(\gamma/2)} + \varepsilon^2 \right\},$$

where C_2 is a constant.

Typically $R^+(\theta)$ is very close to $R(\theta)$ and the ratio $R^+(\theta)/(n\varepsilon^2)$ is small. Therefore both methods should work like the Akaike criterion in the case of known noise variance. Our simulations in Section 2.4 confirm this fact.

2.3 Proofs

The cornerstone idea of the proofs presented in this chapter is based on two simple probabilistic facts.

Lemma 1 *Let $W(t)$ be a Wiener process. Then for any $\alpha \geq 0$*

$$\mathbf{P} \left\{ \sup_{t \geq 0} \left[W(t) - \frac{\alpha t}{2} \right] > x \right\} \leq \exp(-\alpha x).$$

Proof. This well-known fact follows from the Doob inequality. It suffices to note that the random process $\zeta(t) = \exp[\alpha W(t) - \alpha^2 t/2]$ is a martingale. ■

Lemma 2 *Let ξ_s be i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$. Then*

$$\mathbf{P} \left\{ \sup_{k \geq 0} \left[\sum_{s=0}^k (\xi_s^2 - 1) - U(\alpha)(k+1) \right] > x \right\} \leq e^{-\alpha x}, \quad \alpha \in (0,1/2) \quad (2.15)$$

$$\mathbf{P} \left\{ \sup_{k \geq 0} \left[\sum_{s=0}^k (1 - \xi_s^2) - \alpha(k+1) \right] > x \right\} \leq e^{-\alpha x}, \quad \alpha > 0, \quad (2.16)$$

where $U(\cdot)$ is defined by (2.10).

Proof. Let $\mathcal{F}_k = \sigma(\xi_0, \dots, \xi_k)$. For a given $\alpha \in (0, 1/2)$, denote

$$\eta_k = \exp \left[\alpha \sum_{s=0}^k (\xi_s^2 - 1) - \alpha U(\alpha)(k+1) \right].$$

Since

$$\mathbf{E} \exp \left[\alpha \sum_{s=0}^k (\xi_s^2 - 1) - \alpha U(\alpha)(k+1) \right] = 1,$$

η_k is a martingale, then (2.15) follows from the Doob inequality.

In order to prove (2.16), we consider the martingale

$$\eta_k^* = \exp \left[\alpha \sum_{s=0}^k (1 - \xi_s^2) - \alpha U^*(\alpha)(k+1) \right],$$

where

$$U^*(\alpha) = 1 - \frac{1}{2\alpha} \log(1 + 2\alpha).$$

It is easy to see by the Taylor formula that $U^*(\alpha) \leq \alpha$. Therefore (2.16) is proved by the Doob inequality. ■

In the context of data-driven fitting, Lemmas 1 and 2 can be rephrased as follows

Lemma 3 *Let ξ_k be i.i.d. $\mathcal{N}(0, 1)$. Then for any data-driven filter $\tilde{h} \in \mathcal{H}^n$*

$$\mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \leq \frac{\Gamma(p)}{(2\alpha)^p}, \quad (2.17)$$

and

$$\mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (\xi_k^2 - 1) - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 \right]_+^p \leq \frac{\Gamma(p)}{[U^{-1}(\alpha)]^p}, \quad (2.18)$$

where $\Gamma(\cdot)$ is Gamma function and $\alpha, p > 0$.

Proof. In order to proof (2.17), consider the Gaussian process

$\xi(h) = \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k$ indexed by $h \in \mathcal{H}^n$. It is easy to see that this process coincides in distribution with $W \left(\sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 \right)$, where $W(\cdot)$ is a standard Wiener

process. Therefore by Lemma 1 we immediately get

$$\begin{aligned}
& \mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \\
& \leq \mathbf{E} \max_{h \in \mathcal{H}^n} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \\
& = \mathbf{E} \max_{h \in \mathcal{H}^n} \left[W \left(\sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 \right) - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \\
& \leq \mathbf{E} \sup_{t \geq 0} [W(t) - \alpha t]_+^p \leq p \int_0^\infty x^{p-1} \exp(-2\alpha x) dx.
\end{aligned}$$

The proof of (2.18) follows from similar arguments and Lemma 2. \blacksquare

2.3.1 Proof of Theorem 1 and Theorem 2

It is based on simple algebra formulas. Let \tilde{h} be an arbitrary data-driven filter. Then we have

$$\begin{aligned}
\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 &= \sum_{k=0}^{n-1} (\tilde{h}_k Z_k - Z_k + \varepsilon \xi_k)^2 \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} (\tilde{h}_k - 1)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (\tilde{h}_k - 1) Z_k \xi_k + \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \\
&= \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k \right\} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \\
&\quad + 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (\tilde{h}_k - 1) \theta_k \xi_k + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (\xi_k^2 - 1).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

On the other hand, for any $\gamma \in (0,1)$ we can decompose the estimation error as follows

$$\begin{aligned}
\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 &= (1 - \gamma)\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 + \gamma\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 \\
&= (1 - \gamma)\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 + \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 \xi_k^2 \\
&\quad - 2\gamma \varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (1 - \tilde{h}_k) \theta_k \xi_k \\
&= (1 - \gamma)\|\tilde{h}Z - \theta\|^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 \\
&\quad + \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 (\xi_k^2 - 1) \\
&\quad - 2\gamma \varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (1 - \tilde{h}_k) \theta_k \xi_k.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Recalling the definition of \bar{h}^A (see (2.4)), we have that for any given $h \in \mathcal{H}^n$

$$\begin{aligned}
\left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^A)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^A \right\} &\leq \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k \right\} \\
&\leq R(\theta, h) + \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 + 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 \theta_k \xi_k + \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} (h_k^2 - 2h_k)(\xi_k^2 - 1).
\end{aligned}$$

Therefore, combining this inequality with (2.19) and (2.20), we obtain

$$\begin{aligned}
(1 - \gamma)\|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 &\leq R(\theta, h) \\
&\quad + 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (\bar{h}_k^A - 1) \theta_k \xi_k - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^A)^2 \theta_k^2 \\
&\quad + (2 - \gamma)\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^A (\xi_k^2 - 1) - \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^A \\
&\quad + 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k) \theta_k \xi_k - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k (\xi_k^2 - 1).
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Finally using Lemma 3 to control two remainder terms in the above inequality, we get

$$(1 - \gamma)\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \leq R(\theta) + \frac{2\varepsilon^2}{\gamma} + \frac{(2 - \gamma)\varepsilon^2}{U^{-1}[\gamma/(2 - \gamma)]}$$

thus finishing the proof of Theorem 1.

In order to prove (2.11), we rewrite (2.21) as follows

$$(1 - \gamma)\|\bar{h}^A Z - \theta\|^2 \leq (1 + \gamma)R(\theta, h) + \sum_{s=1}^4 \chi_s, \quad (2.22)$$

where

$$\begin{aligned} \chi_1 &= 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (\bar{h}_k^A - 1)\theta_k \xi_k - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^A)^2 \theta_k^2, \\ \chi_2 &= 2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k^*)\theta_k \xi_k - \gamma \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k^*)^2 \theta_k^2, \\ \chi_3 &= (2 - \gamma)\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^A (\xi_k^2 - 1) - \gamma\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^A, \\ \chi_4 &= \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k^* (1 - \xi_k^2) - \gamma\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} (h_k^*)^2, \end{aligned}$$

where $h_k^* = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^n} R(\theta, h)$.

It is easy to see that $U^{-1}(\gamma/2) \leq \gamma/2$. Then, by Lemma 1 we get for any $y \geq 0$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left\{\chi_1 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{U^{-1}(\gamma/2)}\right\} &\leq \mathbf{P}\left\{\chi_1 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{\gamma/2}\right\} \leq e^{-y}, \\ \mathbf{P}\left\{\chi_2 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{U^{-1}(\gamma/2)}\right\} &\leq \mathbf{P}\left\{\chi_2 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{\gamma/2}\right\} \leq e^{-y}. \end{aligned}$$

On the other hand, Lemma 2 yields

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left\{\chi_3 \geq \frac{2\varepsilon^2 y}{U^{-1}(\gamma/2)}\right\} &\leq e^{-y}, \\ \mathbf{P}\left\{\chi_4 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{U^{-1}(\gamma/2)}\right\} &\leq \mathbf{P}\left\{\chi_4 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{2U^{-1}(\gamma/2)}\right\} \leq \mathbf{P}\left\{\chi_4 \geq \frac{\varepsilon^2 y}{\gamma}\right\} \leq e^{-y}. \end{aligned}$$

Therefore (2.11) follows from (2.22) and the trivial inequality

$$\mathbf{P}\left(\sum_{i=1}^4 \chi_i \geq z\right) \leq \sum_{i=1}^4 \mathbf{P}\left(\chi_i > z/4\right)$$

which holds true for any random variables χ_i . \blacksquare

2.3.2 Proof of Theorem 3

Rewrite (2.19) in the following form

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^K Z - \theta\|^2 &= \mathbf{E}_\theta \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^K)^2 Z_k^2 + (K-1)\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K \right\} - n\varepsilon^2 \\
&+ 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K (\xi_k^2 - 1) - 2\varepsilon \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^K) \theta_k \xi_k \\
&+ (2-K)\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K.
\end{aligned} \tag{2.23}$$

According to the definition of \bar{h}^K ,

$$\mathbf{E}_\theta \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^K)^2 Z_k^2 + (K-1)\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K \right\} \leq R^K(\theta) + n\varepsilon^2.$$

Thus, combining this inequality with (2.20) and (2.23), we get

$$\begin{aligned}
(1-\gamma)\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^K Z - \theta\|^2 &\leq R^K(\theta) + \\
&+ 2\varepsilon \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (\bar{h}_k^K - 1) \theta_k \xi_k - \gamma \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^K)^2 \theta_k^2 \\
&+ (2-\gamma)\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K (\xi_k^2 - 1) - (2-\gamma)\alpha\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K \\
&+ [(2-\gamma)(1+\alpha) - K]\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^K.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

If $K \geq 2$ we chose

$$\gamma = \frac{2\alpha}{1+\alpha}.$$

It is clear that in this case $(2-\gamma)(1+\alpha) - K \leq 0$ and we obtain from (2.24) and Lemma 3 the following upper bound

$$\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{E}_\theta \|\hat{\theta}(\bar{h}^K) - \theta\|^2 \leq R^K(\theta) + \frac{(1+\alpha)\varepsilon^2}{\alpha} + \frac{2\varepsilon^2}{(1+\alpha)U^{-1}(\alpha)}$$

thus proving the first part of the theorem. On the other hand, if $K < 2$ we take

$$\gamma = \frac{2+2\alpha-K}{1+\alpha}$$

and by the same arguments we arrive at

$$\frac{K-1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^K Z - \theta\|^2 \leq R^K(\theta) + \frac{2(1+\alpha)\varepsilon^2}{2+2\alpha-K} + \frac{K\varepsilon^2}{(1+\alpha)U^{-1}(\alpha)}. \quad \blacksquare$$

2.3.3 Proof of Theorem 4

We begin with a simple generalization of Lemma 3 for class of all convex combinations of M projection filters.

Lemma 4 *Let ξ_k be i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$ and $p \geq 1$. Then for any $\alpha > 0$ and any data-driven filter $\hat{h} \in \mathcal{C}_M^n$ we have*

$$\mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \leq \frac{\Gamma(p) M^p}{(2\alpha)^p} \quad (2.25)$$

and

$$\mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \hat{h}_k (\xi_k^2 - 1) - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} \hat{h}_k^2 \right]_+^p \leq \frac{\Gamma(p) M^p}{[U^{-1}(\alpha)]^p}. \quad (2.26)$$

Proof. Since $\hat{h} = \sum_{s=1}^M \lambda_s \tilde{h}_s$, where $\tilde{h}_s \in \mathcal{H}^n$, we have by (2.17)

$$\begin{aligned} & \mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \\ &= \mathbf{E} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \sum_{s=1}^M \lambda_s (1 - \tilde{h}_{s,k}) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{s=1}^M \lambda_s (1 - \tilde{h}_{s,k}) \right)^2 \theta_k^2 \right]_+^p \\ &\leq \mathbf{E} \left[\sum_{s=1}^M \lambda_s \left(\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_{s,k}) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_{s,k})^2 \theta_k^2 \right) \right]_+^p \\ &\leq M^{p-1} \mathbf{E} \sum_{s=1}^M \lambda_s^p \left[\sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_{s,k}) \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_{s,k})^2 \theta_k^2 \right]_+^p \leq \frac{\Gamma(p) M^p}{(2\alpha)^p}. \end{aligned}$$

Inequality (2.26) is proved by the same argument and the following inequality

$$U^{-1}(\lambda x) \geq \lambda U^{-1}(x)$$

which holds true for any $\lambda \in (0,1)$. Its proof follows directly from the Taylor formula

$$U(\lambda x) = \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(2\lambda x)^{k-1}}{k} \leq \lambda \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(2x)^{k-1}}{k} = \lambda U(x)$$

and from the fact that $U^{-1}(\cdot)$ is a monotone function. \blacksquare

Lemma 5 Let ξ_k be i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$. Then for any $\alpha > 0$ and any data-driven filter $\hat{h} \in \mathcal{C}_M^n$

$$\mathbf{E} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k \xi_k - \alpha \mathbf{E} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \leq \frac{1}{2\alpha}, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{E} \sum_{k=0}^{n-1} (\hat{h}_k)^2 (1 - \xi_k^2) - \alpha \mathbf{E} \sum_{k=0}^{n-1} (\hat{h}_k)^2 \leq \frac{1}{\alpha}. \quad (2.28)$$

Proof. For a sequence x_k denote by Δx_k differences between adjacent elements of x i. e. $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$. Notice that for $\hat{h} \in \mathcal{C}_M^n$ we have $\hat{h}_0 = 1$ and $\hat{h}_k \geq \hat{h}_{k+1}$. Therefore using the Abel formula (discrete integration by parts), we obtain

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \\ &= - \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \Delta \sum_{s=k}^{n-1} \theta_s \xi_s - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{s=k}^{n-1} \theta_s \xi_s \Delta (1 - \hat{h}_{k-1})^2 - \alpha \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \hat{h}_k)^2 \theta_k^2 \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \left[\sum_{s=k}^{n-1} \theta_s \xi_s - \alpha \sum_{s=k}^{n-1} \theta_s^2 \right] \Delta (1 - \hat{h}_{k-1})^2 \\ &\leq \sum_{k=1}^{n-1} \sup_p \left[\sum_{s=p}^{n-1} \theta_s \xi_s - \alpha \sum_{s=p}^{n-1} \theta_s^2 \right] \Delta (1 - \hat{h}_{k-1})^2 = \sup_k \left[\sum_{s=k}^{n-1} \theta_s \xi_s - \alpha \sum_{s=k}^{n-1} \theta_s^2 \right]. \end{aligned}$$

The rest of the proof of (2.27) follows from Lemma 1 (see also the proof of Lemma 3). The inequality (2.28) can be proved by the same argument based on the Abel formula and (2.16). ■

Proof of Theorem 4. It follows the main lines of the proof of Theorem 1. By the definition of \bar{h}^M we have

$$\begin{aligned} & \mathbf{E}_\theta \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^M)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^M \right\} \\ & \leq \min_{h \in \mathcal{C}_M^n} \mathbf{E}_\theta \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (1 - h_k)^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} h_k \right\} = \inf_{h \in \mathcal{C}_M^n} R(\theta, h) + \varepsilon^2 n. \end{aligned}$$

Therefore, combining this inequality with (2.19) and (2.20), we get

$$\begin{aligned}
(1 - \gamma)\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^M Z - \theta\|^2 &\leq \inf_{h \in \mathcal{C}_M^n} R(\theta, h) \\
&+ 2\varepsilon\gamma\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^M)^2 \theta_k \xi_k - \gamma^2\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^M)^2 \theta_k^2 \\
&+ 2(1 - \gamma)\varepsilon\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (\bar{h}_k^M - 1)\theta_k \xi_k - \gamma(1 - \gamma)\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^M)^2 \theta_k^2 \\
&+ 2\varepsilon^2\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^M (\xi_k^2 - 1) - \gamma(1 - \gamma)\varepsilon^2\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} [\bar{h}_k^M]^2 \\
&+ \gamma\varepsilon^2\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} [\bar{h}_k^M]^2 (1 - \xi_k^2) - \gamma^2\varepsilon^2\mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} [\bar{h}_k^M]^2.
\end{aligned}$$

Finally, we use Lemmas 4, 5 to control the remainder terms at the right-hand side of the above inequality. So, using that $M \geq 2$ and $\gamma \in (0, 1)$, we get

$$\begin{aligned}
(1 - \gamma)\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^M Z - \theta\|^2 &\leq \inf_{h \in \mathcal{C}_M^n} R(\theta, h) \\
&+ 2\varepsilon^2 + \frac{2M(1 - \gamma)\varepsilon^2}{\gamma} + \frac{2M\varepsilon^2}{U^{-1}[\gamma(1 - \gamma)/2]} + \gamma^2\varepsilon^2.
\end{aligned}$$

thus finishing the proof. \blacksquare

2.3.4 Proof of Theorem 5

In the rest of the chapter, C will denote a generic constant, which may change even within the same equation. Denote for brevity

$$\|h\|_1 = \sum_{k=0}^{n-1} h_k.$$

The proofs of Theorem 5 and Theorem 6 rely on two simple ideas. The first one is related to the fact that a good adaptive filter \hat{h} cannot have a very large bandwidth. It means, for instance, that the norm $\|\hat{h}\|_1$ can be controlled by $\|h^*\|_1$, where $h^* = \arg \min_{h \in \mathcal{H}^{n/4}} R(\theta, h)$. The second idea is that the variance estimate $\|\hat{h}Z - Z\|^2/n$ always provides a good *upper bound* for the unknown noise variance.

Lemma 6 *For some constant C*

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1^2 \leq C[R(\theta, h^*)/\varepsilon^2]^2. \quad (2.29)$$

Proof. It is clear from the definition of \bar{h}^B that

$$\frac{\|\bar{h}^B Z - Z\|^2}{1 - 2\|\bar{h}^B\|_1/n} \leq \frac{\|h^* Z - Z\|^2}{1 - 2\|h^*\|_1/n}.$$

This yields immediately

$$\begin{aligned} \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 + \frac{2}{n}\|\bar{h}^B Z - Z\|^2\|\bar{h}^B\|_1 - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \\ \leq \frac{\|h^* Z - Z\|^2}{1 - 2\|h^*\|_1/n} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2. \end{aligned} \quad (2.30)$$

It is easy to check by a simple algebra that

$$\mathbf{E}_\theta \left[\frac{\|h^* Z - Z\|^2}{1 - 2\|h^*\|_1/n} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right]^2 \leq \frac{5[R(\theta, h^*)]^2}{(1 - 2\|h^*\|_1/n)^2}. \quad (2.31)$$

Therefore it remains to bound from below the left-side of (2.30). We have

$$\begin{aligned} \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 + \frac{2}{n}\|\bar{h}^B Z - Z\|^2\|\bar{h}^B\|_1 - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \\ \geq -\varepsilon^2\|\bar{h}^B\|_1 \left[\frac{7}{6} \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) - \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right]_+ \\ - \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) \left[-2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B) \xi_k \theta_k - \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B)^2 \theta_k^2 \right]_+ \\ - \varepsilon^2 \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) \left[\sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B (\xi_k^2 - 1) - \frac{1}{6} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B \right]_+ \end{aligned} \quad (2.32)$$

By Lemma 3 we obtain

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\theta \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right)^2 \left[-2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B) \xi_k \theta_k - \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B)^2 \theta_k^2 \right]_+^2 \leq C\varepsilon^4 \\ \mathbf{E}_\theta \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right)^2 \left[\sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B (\xi_k^2 - 1) - \frac{1}{6} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B \right]_+^2 \leq C. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Denote

$$A = \left\{ \xi_0, \dots, \xi_{n-1} : \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 - \frac{7}{4} \geq \frac{1}{8} \right\}.$$

Since $\|\bar{h}^B\|_1 \leq n/4$, we obviously get

$$\mathbf{1}(A) \left[\frac{7}{6} \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) - \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right]_+^2 = 0$$

and

$$\mathbf{1}(A^c) \left[\frac{7}{6} \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) - \frac{2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right]_+^2 \leq \mathbf{1}(A^c) \left[\frac{7}{6} \left(1 + \frac{2\|\bar{h}^B\|_1}{n} \right) \right]^2 \leq 4\mathbf{1}(A^c).$$

Therefore with (2.30)-(2.33) we obtain

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1^2 \leq \frac{5[R(\theta, h^*)/\varepsilon^2]^2}{(1 - 2\|h^*\|_1/n)^2} + C + n^2 \mathbf{P}(A^c).$$

To finish the proof, it suffices to note that in view of the Markov inequality

$$\mathbf{P}(A^c) = \mathbf{P} \left\{ \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \xi_k^2) \geq \frac{\sqrt{n}}{16} \right\} \leq \exp(-Cn). \quad \blacksquare$$

Lemma 7 *Let $\tilde{h} \in \mathcal{H}^n$ be an arbitrary data-driven projection filter. Then*

$$\mathbf{E}_\theta \left[\varepsilon^2 - \frac{\|\tilde{h}Z - Z\|^2}{n} \right]_+^2 \leq \frac{C\varepsilon^4}{n} + \frac{C\varepsilon^4}{n^2} \mathbf{E}_\theta \|\tilde{h}\|_1^2. \quad (2.34)$$

Proof. We have

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 - \frac{\|\tilde{h}Z - Z\|^2}{n} &= \frac{\varepsilon^2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \xi_k^2) + \frac{2\varepsilon^2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 \\ &\quad - \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 - \frac{2\varepsilon}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k \xi_k \\ &\quad + \frac{\varepsilon^2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (\xi_k^2 - 1) - \frac{\varepsilon^2}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Since

$$\mathbf{E} \left[\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (\xi_k^2 - 1) \right]^2 = \frac{2}{n}, \quad (2.36)$$

it remains to control the last two lines at the right-hand side of (2.35). By Lemma 3 we get

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\theta \left[-2\varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k \xi_k - \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \tilde{h}_k)^2 \theta_k^2 \right]_+^2 &\leq C\varepsilon^4, \\ \mathbf{E}_\theta \left[\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k (\xi_k^2 - 1) - \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{h}_k^2 \right]_+^2 &\leq C. \end{aligned}$$

Finally combining these inequalities with (2.35)-(2.36), we arrive at (2.34). \blacksquare

Proof of Theorem 5. We can easily complete it with Lemma 6 and Lemma 7. The idea is to bound from below the right-hand side at (2.30). First of all note that from (2.30) we get

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 + \frac{2}{n} \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 \|\bar{h}^B\|_1 - n\varepsilon^2 \\ &= \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 - \varepsilon^2 n + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \\ &\quad + 2\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \left[\frac{\|\bar{h}^B Z - Z\|^2}{n} - \varepsilon^2 \right] \leq \frac{R(\theta, h^*)}{1 - 2\|h^*\|_1/n}. \end{aligned} \tag{2.37}$$

The first three terms at the left-hand side can be controlled by a simple algebra and Lemma 3. Using (2.20), we get

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 - \varepsilon^2 n + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \\ &= \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - \theta\|^2 + 2\varepsilon \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B) \theta_k \xi_k + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B (1 - \xi_k^2) \\ &= (1 - \gamma) \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - \theta\|^2 \\ &\quad + 2\varepsilon \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B) \theta_k \xi_k + \gamma \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} (1 - \bar{h}_k^B)^2 \theta_k^2 \\ &\quad + (2 - \gamma) \varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B (1 - \xi_k^2) + \gamma \varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \sum_{k=0}^{n-1} \bar{h}_k^B. \end{aligned}$$

Next in view of Lemma 3, we obtain

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - Z\|^2 - \varepsilon^2 n + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \\ &\geq (1 - \gamma) \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B Z - \theta\|^2 - \frac{2\varepsilon^2}{\gamma} - \frac{2\varepsilon}{U^{-1}(\gamma/2)}. \end{aligned} \tag{2.38}$$

The last term at the left-hand side of (2.37) can be bounded by the Cauchy-Schwarz inequality and Lemmas 6, 7:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \left[\frac{\|\bar{h}^B Z - Z\|^2}{n} - \varepsilon^2 \right] &\geq -\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^B\|_1 \left[\varepsilon^2 - \frac{\|\bar{h}^B Z - Z\|^2}{n} \right]_+ \\ &\geq -\frac{CR^+(\theta)}{\sqrt{n}} - \frac{C[R^+(\theta)]^2}{\varepsilon^2 n} \geq -\frac{C[R^+(\theta)]^2}{\varepsilon^2 n} - \varepsilon^2. \end{aligned}$$

This inequality and (2.37)-(2.38) complete the proof of the theorem. \blacksquare

2.3.5 Proof of Theorem 6

It is quite similar to the proof of Theorem 5. The only difference is related with the inequality (2.30) which is now replaced by

$$\begin{aligned} \|\bar{h}^C Z - Z\|^2 + \frac{2}{n} \|\bar{h}^C Z - Z\|^2 \|\bar{h}^C\|_1 - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \\ \leq \frac{\|h^* Z - Z\|^2}{(1 - \|h^*\|_1/n)^2} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2. \end{aligned} \tag{2.39}$$

This inequality follows immediately from the definition of \bar{h}^C and the elementary inequality

$$\frac{1}{(1-x/2)^2} \geq 1+x, \quad x \in [0,2).$$

It is not difficult to check that

$$\mathbf{E}_\theta \left[\frac{\|h^* Z - Z\|^2}{(1 - \|h^*\|_1/n)^2} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right]^2 \leq \frac{5[R(\theta, h^*)]^2}{(1 - \|h^*\|_1/n)^4}, \tag{2.40}$$

$$\mathbf{E}_\theta \left[\frac{\|h^* Z - Z\|^2}{(1 - \|h^*\|_1/n)^2} - \varepsilon^2 \sum_{k=0}^{n-1} \xi_k^2 \right] \leq \frac{R(\theta, h^*)}{(1 - \|h^*\|_1/n)^2}. \tag{2.41}$$

Therefore we get from (2.39) and (2.40) (see the proof of Lemma 6)

$$\mathbf{E}_\theta \|\bar{h}^C\|_1^2 \leq C[R(\theta, h^*)/\varepsilon^2]^2.$$

Using the above inequality and (2.39)-(2.41), we complete the proof of the theorem (see the proof of Theorem 5 for more detail). \blacksquare

2.4 Simulations

In this section, we illustrate numerically Theorems 1, 5, 6. Our principle idea is to measure statistical performance of a data-driven filter \tilde{h} by its *oracle efficiency* defined by

$$e_{or}(\theta, \tilde{h}) = \frac{\inf_{h \in \mathcal{H}^n} \mathbf{E}_\theta \|hZ - \theta\|^2}{\mathbf{E}_\theta \|\tilde{h}Z - \theta\|^2}.$$

Obviously, we cannot compute this efficiency for all θ 's. Therefore we choose a sufficiently simple but representative family of vectors θ . In what follows we shall use the following linear family

$$\theta_k(a) = \frac{a\varepsilon\mu_k}{1 + (k/W)^m},$$

where a is called amplitude, W bandwidth, and m smoothness, and μ_k are *i.i.d.* random variables taking values $-1, +1$ with equal probabilities. We shall vary a in a large range and plot $e_{or}(\theta(a), \tilde{h})$ as a function of a . The parameters $m = 6$ and $W = 6$ are fixed. In other examples of (W, m) the authors looked at, simulations showed that the oracle efficiency exhibits similar behavior. Notice that for all data-driven filters considered in the chapter, $e_{or}(\theta(a), \tilde{h})$ does not depend on ε . In our simulations, this function was computed by the Monte-Carlo method with 40000 replications. The parameters of the numerical experiment (the coefficients $\theta_k(a)$ and the corresponding regression function) are shown at Figure 2.1. Figure 2.2 represents graphically the oracle efficiencies for three methods: the classical Akaike method with known variance (solid line), the method (2.6) (dashed line) and (2.7) (dash-dot line). Even a quick look at this plot shows that all these methods work well: the minimal oracle efficiency is of degree 0.3 and for moderately large $a > 3$ it is greater than 0.7. We see also that the unknown noise variance does affect the oracle efficiency. Moreover, at the first glance, what see here looks surprising: the method (2.6) overperforms the Akaike criterion. In fact, this phenomenon is not very surprising, since it illustrates the fact that the principle of unbiased estimation is not optimal. There exist more efficient algorithms based on the idea of risk hull minimization (see [4] for detail).

We finish this section with very short comments on numerical properties of the convex combination of projection methods. From the asymptotic viewpoint (see Theorem 4 and Theorem 1), this method should work better than the simple projection technique since

$$\min_{h \in \mathcal{C}_M^n} R(\theta, h) \leq \min_{h \in \mathcal{H}^n} R(\theta, h).$$

On the other hand, the remainder term in Theorem 4 is greater than that one in Theorem 1. So, for small data sets, the real advantages of the method based on convex combinations are not clear. Moreover, in majority numerical simulations

CHAPITRE 2. ON ORACLE INEQUALITIES RELATED TO A POLYNOMIAL FITTING

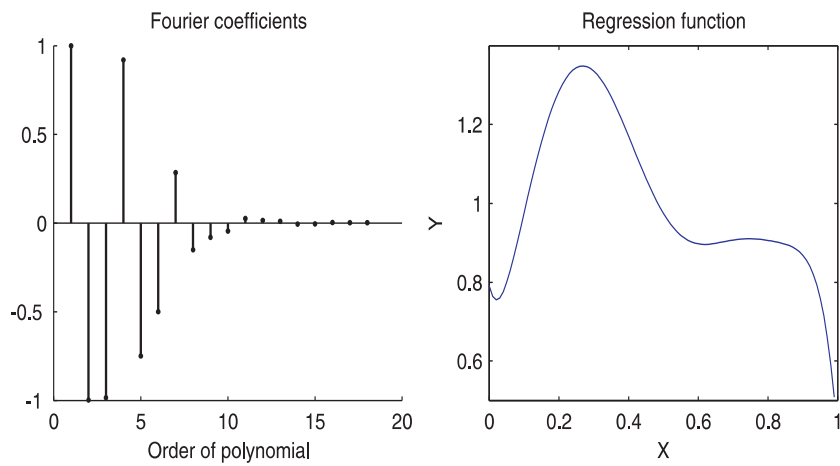


FIG. 2.1 – Model parameters for \bar{h}^A , \bar{h}^B , and \bar{h}^C

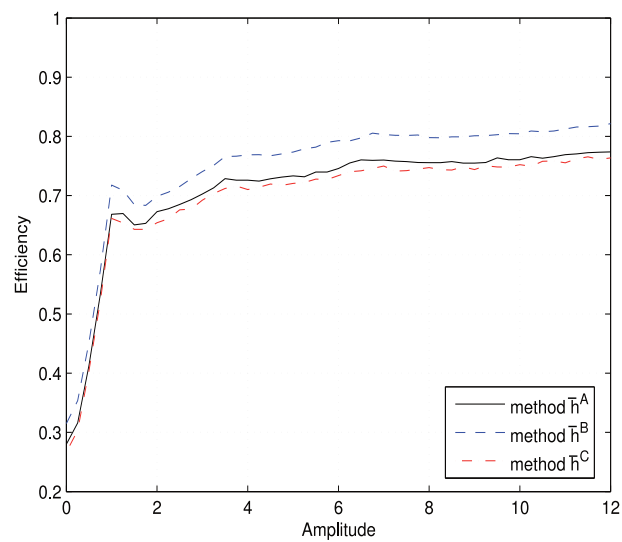


FIG. 2.2 – Oracle efficiencies of \bar{h}^A , \bar{h}^B and \bar{h}^C .

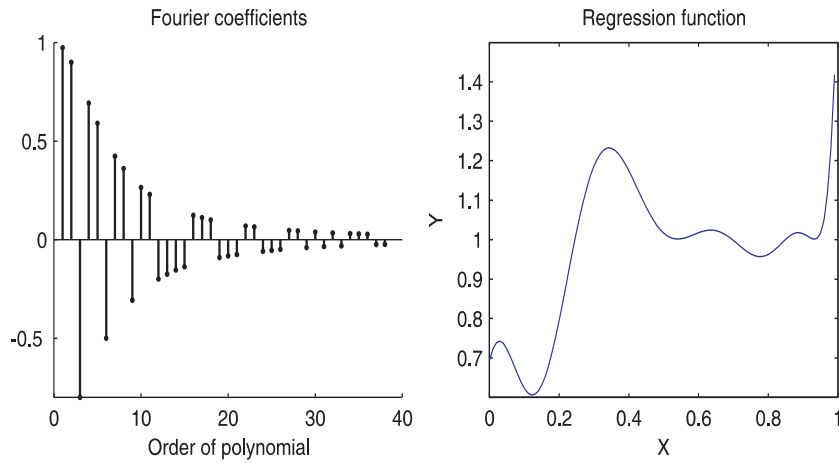


FIG. 2.3 – *Model parameters for the convex combinations approach.*

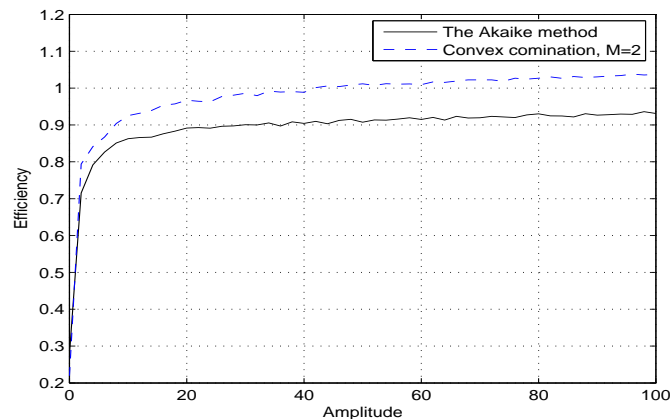


FIG. 2.4 – *Oracle efficiency of the convex combination of two projection estimates.*

we looked at, the performances of both methods are similar. However, the convex combination exhibits better performance for slowly decreasing θ_k^2 . We illustrate this effect in the next numerical experiment with parameters shown at Figure 2.3. Here $m = 2$, $W = 6$; the number of Monte-Carlo replications is 2000. The oracle efficiencies of the simple projection Akaike filter (solid line) and convex combination of two projection estimates (dashed line) are shown at Figure 2.4. We see that the convex combination works only slightly better than the standard method. On the other hand, we would like to draw attention on the fact that the numerical complexity of the convex combination approach is rather high.

CHAPITRE 2. ON ORACLE INEQUALITIES RELATED TO A
POLYNOMIAL FITTING

Chapitre 3

On adaptive regression estimation by smoothing splines

3.1 Introduction and main results

The classical spline, a wooden beam was probably invented to draw ship hulls. The earliest available mention of a spline (see Fig 3.1) seems to be [9]. Nowadays, computerized splines are widely used in various engineering applications. In statistics, splines are often viewed as a basic tool since they provide a very efficient smoothing technique. We refer interested readers to [10], [14] and [27], where numerous examples of splines applications can be found. This chapter focuses on some statistical problems related to data-driven methods for choosing the spline smoothing parameter. For simplicity, we will deal with the Gaussian regression assuming that we have at our disposal the noisy data

$$Y_i = f(X_i) + \sigma\epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

where $X_1 < X_2 < \dots < X_n$ are known design points onto $[0,1]$, and ϵ_i are *i.i.d.* $\mathcal{N}(0,1)$. The function $f(x)$ is assumed to be unknown but smooth and our goal is to

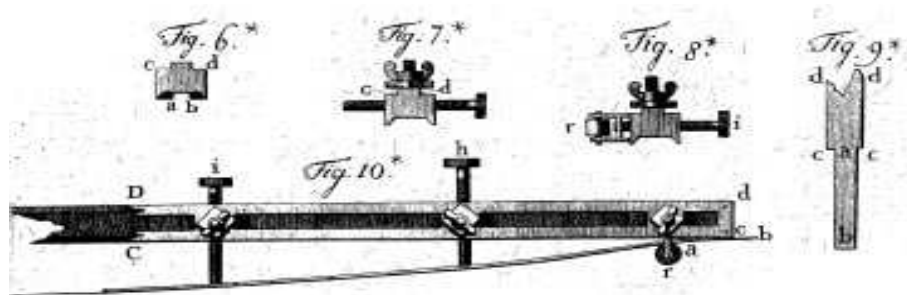


FIG. 3.1 – *Mechanical spline*

estimate this function on the basis of Y_1, \dots, Y_n . In this chapter, $f(x)$ is recovered with the help of a smoothing spline which is defined as a solution of the following optimization problem

$$\hat{f}_\alpha(x) = \arg \min_f \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2 + \alpha \int_0^1 [f^{(m)}(x)]^2 dx \right\}, \quad (3.2)$$

where $f^{(m)}(\cdot)$ denotes the derivative of order m and $\alpha > 0$ is called *smoothing spline parameter*. The most remarkable numerical properties of $\hat{f}_\alpha(x)$ is due to the Reinsch algorithm which enables to compute the spline in $\mathcal{O}(n)$ operations (see the Appendix A for details). We measure the quality of $\hat{f}_\alpha(x)$ by the mean square risk

$$R(\hat{f}_\alpha, f) = \mathbf{E} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - \hat{f}_\alpha(X_i)]^2,$$

where \mathbf{E} stands for the expectation with respect to the measure generated by Y_1, \dots, Y_n . Obviously this risk depends on α and the main goal in this chapter is to study certain data-driven methods for choosing this parameter. We restrict ourselves to the principle of the unbiased risk estimation (see [24]) which is very popular in statistical applications. The motivation of this method, going back to [1], [18] and [22], is rather transparent. Since the optimization problem (3.2) is quadratic in f , \hat{f}_α is a linear functional of $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$, and thus

$$\hat{\mathbf{f}}_\alpha = S_\alpha \mathbf{Y},$$

where $\hat{\mathbf{f}}_\alpha = (\hat{f}_\alpha(X_1), \dots, \hat{f}_\alpha(X_n))^T$, $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$ and S_α is a $n \times n$ matrix. Therefore we obviously have

$$R(\hat{f}_\alpha, f) = \mathbf{E} \|\mathbf{f} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 / n = \|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2 / n + \sigma^2 \text{tr}(S_\alpha S_\alpha^T) / n. \quad (3.3)$$

The main idea of the unbiased risk estimation is to minimize the right-hand side at (3.3) on the basis of the observations. Replacing $\|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2$ by its unbiased estimate, which can be easily computed since

$$\mathbf{E} \|(I - S_\alpha)\mathbf{Y}\|^2 = \|(I - S_\alpha)\mathbf{f}\|^2 + \sigma^2 n - 2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha) + \sigma^2 \text{tr}(S_\alpha S_\alpha^T),$$

we arrive with (3.3) at the following data-driven choice:

$$\hat{\alpha} = \arg \min_{\alpha > 0} \left\{ \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 + 2\sigma^2 \text{tr}(S_\alpha) \right\}. \quad (3.4)$$

From the practical viewpoint, this method has a small drawback because $\hat{\alpha}$ depends on σ^2 which is hardly known in practice. Fortunately, there is a simple trick to overcome this difficulty. Let us estimate σ^2 by

$$\hat{\sigma}^2 = \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 / n$$

and plug-in this estimate in (3.4). Thus we get

$$\hat{\alpha} \approx \arg \min_{\alpha > 0} \left\{ \|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2 \left[1 + 2\text{tr}(S_\alpha)/n \right] \right\}.$$

In practice, a slightly modified criterion is typically used. To motivate this method let us note that $\text{tr}(S_\alpha)$ can be viewed as an effective dimension of the smoothing spline. So, the spline method provides a visible data smoothing if $\text{tr}(S_\alpha) \ll n$. In this case, the set of admissible α can be reduced to $\text{tr}(S_\alpha)/n \ll 1$, and therefore by the Taylor formula

$$[1 + 2\text{tr}(S_\alpha)/n] \approx [1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^{-2}.$$

Thus, we get the following method

$$\hat{\alpha}_{GCV} = \arg \min_{\alpha > 0} \frac{\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2}{[1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^2} \quad (3.5)$$

which is called *generalized cross validation* (GCV). Notice here that there is a very effective numerical algorithm for computing $\hat{\alpha}_{GCV}$ (see [14] for detail).

The main goal in this chapter is to provide the so-called oracle inequalities related to $\hat{\alpha}$ and $\hat{\alpha}_{GCV}$. In other words, we are looking for uniform upper bounds for $R(\hat{f}_{\hat{\alpha}}, f)$ and $R(\hat{f}_{\hat{\alpha}_{GCV}}, f)$ in terms of the risk of the oracle $\inf_{\alpha} R(\hat{f}_{\alpha}, f)$. Our first result concerns the method of the unbiased risk estimation.

Theorem 7 *Uniformly in f and $\gamma \in (0, 1)$*

$$R(\hat{f}_{\hat{\alpha}}, f) \leq \frac{1}{1 - \gamma} \left\{ \inf_{\alpha} R(\hat{f}_{\alpha}, f) + \frac{C\sigma^2}{n\gamma} \right\}. \quad (3.6)$$

Here and in the rest of the chapter, C denotes a generic constant, which may change even within the same equation.

The case of the unknown noise variance is more complicated and we could not prove a similar fact for the original GCV method without restrictions on possible values of α . Therefore we consider the following truncated GCV criterion

$$\hat{\alpha}_G = \arg \min_{\alpha: \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}} \frac{\|\mathbf{Y} - S_\alpha \mathbf{Y}\|^2}{[1 - \text{tr}(S_\alpha)/n]^2}. \quad (3.7)$$

Theorem 8 *Uniformly in f and $\gamma \in (0, 1)$*

$$R(\hat{f}_{\hat{\alpha}_G}, f) \leq \frac{1}{1 - \gamma} \left\{ \inf_{\alpha: \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}} R(\hat{f}_{\alpha}, f) \left[1 - \frac{1}{\sqrt{n}} \right]^{-2} + \frac{C\sigma^2}{n\gamma} \right\}. \quad (3.8)$$

Unfortunately, the precise evaluation of the constant C in Theorem 7 and 8 is a very delicate problem. Our estimate of C by the Monte-Carlo method gives $C \leq 3$.

Remark 1. It seems at the first glance that the difference between $\hat{\alpha}_{GCV}$ and $\hat{\alpha}_G$ may result in different oracle inequalities. However, if the underlying regression function is sufficiently smooth, then

$$\min_{\alpha: \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}} R(\hat{f}_\alpha, f) = \min_{\alpha} R(\hat{f}_\alpha, f).$$

A heuristic explanation of this equality is based to the fact that $\text{tr}(S_\alpha)$ is related to the effective dimension of the linear space used by the spline method and therefore, $\text{tr}(S_\alpha) = \mathcal{O}(\text{tr}(S_\alpha S_\alpha^T))$. Obviously, smooth functions can be well approximated by linear spaces with low dimensions thus resulting in $\min_{\alpha} R(\hat{f}_\alpha, f) \leq \mathcal{O}(\sigma^2 n^{-1/2})$. This means, in view of (3.3), that

$$\arg \min_{\alpha} R(\hat{f}_\alpha, f) \in \{\alpha : \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}\}.$$

Notice also that the rate of convergence $\mathcal{O}(\sigma^2 n^{-1/2})$ means that the underlying regression function has Sobolev's smoothness $1/2$.

Remark 2. In fact, the condition $\{\alpha : \text{tr}(S_\alpha) \leq \sqrt{n}\}$ can be relaxed to $\{\alpha : \text{tr}(S_\alpha) \leq n/5\}$. However, in the latter case, the proof of Theorem 8 becomes cumbersome and therefore we have preferred, in this chapter, to present a less general but more transparent proof.

Standard mathematical applications of Theorem 7 and 8 are related to asymptotically minimax ($n \rightarrow \infty$) convergence rates on Sobolev balls. Let $\mathbb{W}_2^m(L)$ be the Sobolev ball

$$\mathbb{W}_2^m(L) = \left\{ f : \int_0^1 [f^{(m)}(u)]^2 du \leq L \right\}$$

and suppose that the performance of an estimate $\hat{f}(x)$ is measured by its minimax risk

$$r_n(\hat{f}) = \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m(L)} \frac{1}{n} \mathbf{E} \sum_{i=1}^n [f(X_i) - \hat{f}(X_i)]^2.$$

Then, under mild assumptions on the design $X_i, i = 1, \dots, n$, combining Theorem 7 and 8 with the lower bound from [21], one can show that $n \rightarrow \infty$

$$\inf_{\hat{f}} r_n(\hat{f}) = (1 + o(1)) \kappa(m) r_n(\hat{f}_{\hat{\alpha}_G}) = (1 + o(1)) \kappa(m) r_n(\hat{f}_{\hat{\alpha}}), \quad (3.9)$$

where \inf is taken over all estimates and the constant $\kappa(m) < 1$ represents the efficiency of the standard smoothing spline (3.2) with respect to the asymptotically best

estimator. For mathematical details, we refer the reader to [23] and [20]. Equation (3.9) yields, in particular, the following well-known fact

$$\mathbf{E} \max_{t \geq 0} [W(t) - \mu t]_+^p \leq \frac{C(p)}{\mu^p}, \quad p, \mu > 0,$$

was at the very core of our approach. For smoothing spline methods, we need similar facts but for essentially more general random processes. Therefore following to [17], we introduce a very simple notion of zero mean *ordered process* $\xi(t)$ characterized by the property $\mathbf{E}\xi(t_1)\xi(t_2) \geq \min\{\mathbf{E}\xi^2(t_1), \mathbf{E}\xi^2(t_2)\}$, and show with the standard chaining argument (see for instance [26]) that

$$\mathbf{E} \max_{t \geq 0} [\xi(t) - \mu \mathbf{E}\xi^2(t)]_+^p \leq \frac{C(p)}{\mu^p}.$$

We will see that this inequality results almost immediately in Theorems 7, 8.

3.2 Proofs

3.2.1 Preliminaries

We begin with a standard linear transformation of the observations, which enables us to simplify numerous technical details. Recall that the design points $X_i, i = 1, \dots, n$, are assumed to be different and belonging to $[0,1]$. Let $\{\varphi_k(x), k = 1, \dots, n\}$ be the Reinsch-Demmler basis (see [8]) defined by

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varphi_k(X_i) \varphi_j(X_i) &= \delta_{kj}, \\ \int_0^1 \varphi_i^{(m)}(x) \varphi_j^{(m)}(x) dx &= \lambda_i \delta_{ij}, \\ 0 = \dots = 0 &< \lambda_m < \dots < \lambda_n, \end{aligned} \tag{3.10}$$

where δ_{ij} is Kronecker's delta. The eigenvalues $\lambda_k, k = 1, \dots, n$, are related to Kolmogorov's diameter (see [25] for detail) of the Sobolev ball

$$\mathbb{W}_2^m(L) = \left\{ f : \int_0^1 [f^{(m)}(u)]^2 du \leq L \right\}$$

Geometric arguments behind the motivation of Kolmogorov's diameter are rather simple. To explain this fact, suppose we want to approximate functions in \mathbb{W}_2^m by linear methods. It means that for given functions $\phi_i, i = 1, \dots, n$ we are interested in the maximal approximation error

$$D^N(\phi) = \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \inf_{c_1, \dots, c_N} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[f(X_i) - \sum_{k=1}^N c_k \phi_k(X_i) \right]^2.$$

Then Kolmogorov's diameter d^N is defined as the minimal approximation error by

$$d^N = \inf_{\phi} D^N(\phi).$$

where \inf is computed over all functions $\phi_k, k = 1, \dots, N$. With a relatively simple algebra one can show that the Reinsch-Demmler basis provides the Kolmogorov diameter of \mathbb{W}_2^m , i.e.

$$d^N = D^N(\varphi) = \lambda_{N+1}^{-1}.$$

Using this basis, we make the following linear transformation of the observation :

$$Z_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \varphi_k(X_i) = \theta_k + \varepsilon \xi_k, \quad (3.11)$$

where

$$\theta_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) \varphi_k(X_i), \quad \xi_k = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \varphi_k(X_i), \quad \varepsilon = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}.$$

Obviously, the statistical model (3.11) and (3.1) are equivalent and therefore we deal from now on with (3.11). Notice that the risk of an estimator \hat{f} can be rewritten in terms of (3.11) as follows

$$R(\hat{f}, f) = \mathbf{E} \sum_{k=1}^n [\hat{\theta}_k - \theta_k]^2, \quad \text{where} \quad \hat{\theta}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{f}(X_i) \varphi_k(X_i).$$

It is also easily to check, in view of (3.10), that the smoothing spline admits the following representation

$$\hat{f}_\alpha(x) = \sum_{k=1}^n h_k(\alpha) Z_k \varphi_k(x), \quad \text{with} \quad h_k(\alpha) = \frac{1}{1 + \alpha \lambda_k}$$

and its risk is computed as follows :

$$R(\hat{f}_\alpha, f) = R(\theta, h(\alpha)) = \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 \theta_k^2 + \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n h_k^2(\alpha).$$

Finally notice that $\hat{\alpha}$ and $\hat{\alpha}_G$ can be expressed in terms of the observations $Z_k, k = 1, \dots, n$ as

$$\hat{\alpha} = \arg \min_{\alpha \geq 0} \left\{ \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \|h(\alpha)\|_1 \right\}, \quad (3.12)$$

$$\hat{\alpha}_G = \arg \min_{\alpha: \|h(\alpha)\| \leq \sqrt{n}} \frac{\sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 Z_k^2}{[1 - \|h(\alpha)\|_1/n]^2}, \quad (3.13)$$

where $\|h(\alpha)\|_1 = \sum_{k=1}^n h_k(\alpha)$.

3.2.2 Ordered processes and their properties

Our method of deriving oracle inequalities is based on a special class of random processes. Let $\xi(t)$, $t \geq 0$ be a random process with $\mathbf{E}\xi(t) = 0$ and a finite variance $\mathbf{E}\xi^2(t) = \sigma^2(t)$ which is assumed to be continuous and monotone

$$\sigma^2(t_2) \geq \sigma^2(t_1), \quad t_2 \geq t_1.$$

The process $\xi(t)$, $t \geq 0$, is called *ordered* if it is separable and for all $t_2 \geq t_1$

$$\mathbf{E}[\xi(t_2) - \xi(t_1)]^2 \leq \sigma^2(t_2) - \sigma^2(t_1). \quad (3.14)$$

Obviously this inequality admits the following equivalent form

$$\mathbf{E}\xi(t_2)\xi(t_1) \geq \min\{\mathbf{E}\xi^2(t_2), \mathbf{E}\xi^2(t_1)\}.$$

Thus, an ordered process can be viewed as a natural generalization of the Wiener process $W(t)$ for which $\mathbf{E}W(t_1)W(t_2) = \min\{\mathbf{E}W^2(t_1), \mathbf{E}W^2(t_2)\}$. We will see that the class of ordered processes is sufficiently broad.

Denote for brevity

$$\Delta_\xi(t_1, t_2) = \frac{\xi(t_1) - \xi(t_2)}{\sqrt{\mathbf{E}[\xi(t_1) - \xi(t_2)]^2}}.$$

The main property of ordered processes is given by the following lemma.

Lemma 8 *Suppose that there exists $\lambda > 0$ such that*

$$\varphi(\lambda) \triangleq \sup_{t_1, t_2} \mathbf{E} \exp\{\lambda \Delta_\xi(t_1, t_2)\} < \infty. \quad (3.15)$$

Then there exists a constant C depending on λ such that for all $T > 0$ and all $p \geq 1$

$$\left[\mathbf{E} \sup_{t, s \in [0, T]} |\xi(t) - \xi(s)|^p \right]^{1/p} \leq Cp\sigma(T). \quad (3.16)$$

Proof. Notice that for $p \geq 1$ the function $L(x) = \log^p(x + e^{p-1})$ is concave on $(0, \infty)$ since

$$L''(x) = \frac{p \log^{p-2}(x + e^{p-1})}{(x + e^{p-1})^2} \left[p - 1 - \log(x + e^{p-1}) \right] \leq 0.$$

In order to prove (3.16), we use the standard chaining arguments (see [26]). For a given integer $s \geq 0$ define points t_k^s on $[0, T]$ by

$$\sigma^2(t_k^s) = \frac{k}{2^s} \sigma^2(T), \quad k = 0, \dots, 2^s - 1$$

and denote by \mathcal{T}^s the set of these points. Let u be an arbitrary point in \mathcal{T}^s . Then we can find a chain i.e. the points $\tau_k(u) \in \mathcal{T}^k$, $k = 0, \dots, s$ such that

- $u = \tau_s(u)$, $0 = \tau_0(u)$

- $|\sigma^2(\tau_k(u)) - \sigma^2(\tau_{k-1}(u))| \leq 2^{-k+1}\sigma^2(T)$

To verify that such points exist, one can imagine the standard binary tree. The nodes of this tree at the level k are associated with the points t_j^k , $j = 0, \dots, 2^k - 1$. It is clear that there exists a unique way connecting $u \in \mathcal{T}^s$ and 0 (top of the tree). This way passes through nodes, which are denoted by $\tau_k(u)$. So we can write

$$u = \sum_{k=0}^{s-1} [\tau_{k+1}(u) - \tau_k(u)]$$

and for two arbitrary points u, v in \mathcal{T}^s we get

$$u - v = \sum_{k=0}^{s-1} [\tau_{k+1}(u) - \tau_k(u)] - \sum_{k=0}^{s-1} [\tau_{k+1}(v) - \tau_k(v)].$$

Therefore by (3.15) we have

$$\begin{aligned} & \left[\mathbf{E} \sup_{u, v \in \mathcal{T}^s} |\xi(u) - \xi(v)|^p \right]^{1/p} \\ & \leq 2 \sum_{k=0}^{s-1} \left[\mathbf{E} \sup_{u \in \mathcal{T}^{k+1}} |\xi(\tau_{k+1}(u)) - \xi(\tau_k(u))|^p \right]^{1/p} \\ & = 2 \sum_{k=0}^{s-1} \left[\mathbf{E} \sup_{u \in \mathcal{T}^{k+1}} |\Delta_\xi(\tau_{k+1}(u), \tau_k(u))|^p \times \right. \\ & \quad \left. \times [\mathbf{E} [\xi(\tau_{k+1}(u)) - \xi(\tau_k(u))]^2]^{p/2} \right]^{1/p} \\ & \leq 2\sigma(T) \sum_{k=0}^{s-1} 2^{-k/2} \left[\mathbf{E} \sup_{u \in \mathcal{T}^{k+1}} |\Delta_\xi(\tau_{k+1}(u), \tau_k(u))|^p \right]^{1/p}. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Next using the convexity of $L(x)$, $x \geq 0$ and (3.15), we obtain

$$\begin{aligned} & \left[\mathbf{E} \sup_{u \in \mathcal{T}^{k+1}} |\Delta_\xi(\tau_{k+1}(u), \tau_k(u))|^p \right]^{1/p} \\ & \leq \frac{1}{\lambda} \log \left[\sum_{u \in \mathcal{T}^{k+1}} \mathbf{E} \exp[\lambda \Delta_\xi(\tau_{k+1}(u), \tau_k(u))] + e^{p-1} \right] \\ & \leq \frac{1}{\lambda} \log [2^{k+1} \varphi(\lambda) + e^{p-1}] = \frac{(k+1) \log(2) + p - 1}{\lambda} + \frac{\log[\varphi(\lambda)]}{\lambda}. \end{aligned}$$

Substituting this in (3.17), we arrive at the inequality

$$\left[\mathbf{E} \sup_{u, v \in \mathcal{T}^s} |\xi(u) - \xi(v)|^p \right]^{1/p} \leq C\sigma(T)$$

which proves the lemma, since by separability of $\xi(t)$

$$\left[\mathbf{E} \sup_{u,v \in [0,T]} |\xi(u) - \xi(v)|^p \right]^{1/p} = \limsup_{s \rightarrow \infty} \left[\mathbf{E} \sup_{u,v \in \mathcal{T}^s} |\xi(u) - \xi(v)|^p \right]^{1/p}. \quad \blacksquare$$

Lemma 8 almost immediately results in the following fact

Lemma 9 *Let $\xi(t)$ be an ordered process satisfying (3.15) and such that $\xi(0) = 0$. Then there exists a constant C depending on λ such that for all $\alpha > 0$*

$$\mathbf{E} \sup_{t \geq 0} [\xi(t) - \alpha \sigma^2(t)]_+^p \leq \frac{C(2p+2)^{2p+2}}{\alpha^p}, \quad (3.18)$$

where $[x]_+ = \max(0, x)$.

Proof. Without loss of generality, we can assume that $\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma^2(t) = \infty$. Then for any integer $k \geq 0$ we define $t_k(\alpha)$ by

$$\sigma(t_k(\alpha)) = \frac{k}{\alpha}.$$

In what follows, we will use the following form of the Markov inequality

$$\mathbf{E} \eta^p \mathbf{1}\{\eta > x\} \leq \frac{\mathbf{E} |\eta|^{p+q}}{x^q} \quad (3.19)$$

which follows immediately from the inequality $\eta^p \mathbf{1}\{\eta > x\} \leq |\eta|^p |\eta/x|^q$.

Using that $f(x) = x^p \mathbf{1}\{x > x_0\}$ is monotone in $x > 0$, we have

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \sup_{t \geq 0} [\xi(t) - \alpha \sigma^2(t)]_+^p &\leq \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{E} \sup_{t \in [t_k(\alpha), t_{k+1}(\alpha)]} \xi^p(t) \mathbf{1}\{\xi(t) \geq \alpha \sigma^2(t)\} \\ &\leq \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{E} \sup_{t \in [t_k(\alpha), t_{k+1}(\alpha)]} \xi^p(t) \mathbf{1}\{\xi(t) \geq \alpha \sigma^2(t_k(\alpha))\} \\ &\leq \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{E} \sup_{t \in [t_k(\alpha), t_{k+1}(\alpha)]} \xi^p(t) \mathbf{1}\left\{ \sup_{t \in [t_k(\alpha), t_{k+1}(\alpha)]} \xi(t) \geq \alpha \sigma^2(t_k(\alpha)) \right\} \\ &\leq \mathbf{E} \sup_{0 \leq t \leq t_1(\alpha)} |\xi(t)|^p \\ &\quad + \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{E} \sup_{0 \leq t \leq t_{k+1}(\alpha)} \xi^p(t) \mathbf{1}\left\{ \sup_{0 \leq t \leq t_{k+1}(\alpha)} \xi(t) \geq \alpha \sigma^2(t_k(\alpha)) \right\}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

By Lemma 8, the first term at the right-hand side of the above inequality is bounded by

$$\mathbf{E} \sup_{0 \leq t \leq t_1(\alpha)} |\xi(t)|^p \leq Cp^p \sigma^p(t_1(\alpha)) = \frac{Cp^p}{\alpha^p} \quad (3.21)$$

whereas for the second term, in view of (3.19), we get the following upper bound

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{E} \sup_{0 \leq t \leq t_{k+1}(\alpha)} \xi^p(t) \mathbf{1} \left\{ \sup_{0 \leq t \leq t_{k+1}(\alpha)} \xi(t) \geq \alpha \sigma^2(t_k(\alpha)) \right\} \\ & \leq C(p+q)^{p+q} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sigma^{p+q}(t_{k+1}(\alpha))}{[\alpha \sigma^2(t_k(\alpha))]^q} = \frac{C(p+q)^{p+q}}{\alpha^p} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{q-p}}. \end{aligned}$$

Setting $q = p + 2$ in the above inequality and using (3.20) together with (3.21), we prove (3.18). ■

3.2.3 Examples of ordered processes

The simplest example of an ordered process is $\xi(t) = \xi t$, where ξ is a zero mean random variable with a finite exponential moment $\mathbf{E} \exp(\lambda \xi) < \infty$ with some $\lambda > 0$. As we have already mentioned, the Wiener process $W(t)$ is an ordered process. At the first glance, ξt and $W(t)$ are quite different, but from the viewpoint of Lemma 9 they are equivalent. Of course, the distribution of $\max_{t \geq 0} [W(t) - \alpha t]$ is well-known

$$\mathbf{P} \left\{ \max_{t \geq 0} [W(t) - \alpha t] \geq x \right\} = \exp(-2\alpha x).$$

The following two examples play an essential role in adaptive estimation. Let $H_k(\mu) \in [0, 1]$ be a non increasing sequence in k and such that

$$\begin{aligned} & H_k(\mu_2) \geq H_k(\mu_1), \quad \text{for all } \mu_1 \geq \mu_2 \text{ and } k = 1, 2, \dots \\ & \lim_{\mu \rightarrow \infty} H_k(\mu) = 0, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.22)$$

Consider the following Gaussian process

$$\xi_1(t) = \sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(t)] \theta_k \xi_k,$$

where ξ_k are *i.i.d.* $\mathcal{N}(0, 1)$ and $\sum_{i=1}^{\infty} \theta_i^2 < \infty$. It is easy to see that $\xi_1(t)$ is an ordered process. Indeed, in view of (3.22) we have for $t_1 \leq t_2$

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \xi_1^2(t_1) &= \sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(t_1)]^2 \theta_k^2 \leq \sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(t_1)] [1 - H_k(t_2)] \theta_k^2 \\ &= \mathbf{E} \xi_1(t_1) \xi_1(t_2), \end{aligned}$$

thus proving that $\xi_1(t)$ is an ordered process. Lemma 9 can be rephrased as follows.

Lemma 10 *Let $H_k(\cdot)$ satisfies (3.22), then for all $\alpha > 0$*

$$\mathbf{E} \sup_{\mu \geq 0} \left[\sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(\mu)] \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(\mu)]^2 \theta_k^2 \right]_+^p \leq \frac{C(p)}{\alpha^p}. \quad (3.23)$$

and

$$\mathbf{E} \sup_{\mu \geq 0} \left[\sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(\mu)]^2 \theta_k \xi_k - \alpha \sum_{k=1}^{\infty} [1 - H_k(\mu)]^4 \theta_k^2 \right]_+^p \leq \frac{C(p)}{\alpha^p}. \quad (3.24)$$

In order to prove (3.24), it suffices to note that if $H_k(\cdot)$ satisfies (3.22), then $H'_k(\cdot) = 2H_k(\cdot) - H_k^2(\cdot)$ satisfies also this condition.

The next important ordered process is defined by

$$\xi_2(t) = \sum_{k=1}^{\infty} H_k(t) (\xi_k^2 - 1),$$

where ξ_k are *i.i.d.* $\mathcal{N}(0,1)$ and $H_k(t)$ satisfies (3.22). It is easy to check that

$$\mathbf{E} \xi_2^2(t_1) \leq \mathbf{E} \xi_2(t_2) \xi_2(t_1), \quad t_1 \leq t_2.$$

So, in order to apply Lemma 9, it remains to check (3.15). Denoting for brevity

$$\|H(t_2) - H(t_1)\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} [H_k(t_2) - H_k(t_1)]^2,$$

we have

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \exp[\lambda \Delta_{\xi}(t_2, t_1)] &= \exp \left[-\frac{\lambda}{\sqrt{2} \|H(t_2) - H(t_1)\|} \sum_{k=1}^{\infty} [H_k(t_2) - H_k(t_1)] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \log \left(1 - \sqrt{2} \lambda \frac{H_k(t_2) - H_k(t_1)}{\|H(t_2) - H(t_1)\|} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Since obviously

$$\max_k [H_k(t_2) - H_k(t_1)] \leq \|H(t_2) - H(t_1)\|,$$

then using the Taylor expansion for $\log(1 - \cdot)$ at the right-hand side of (3.25), we get for $\lambda \leq 1/2$

$$\mathbf{E} \exp[\lambda \Delta_{\xi}(t_2, t_1)] \leq \exp(C\lambda^2),$$

thus proving (3.24). Therefore using Lemma 9, we obtain the following fact.

Lemma 11 *Let $H_k(\cdot)$ satisfies (3.22), then for all $\alpha > 0$*

$$\mathbf{E} \max_{\mu > 0} \left[\sum_{k=1}^{\infty} H_k(\mu)(\xi_k^2 - 1) - \alpha \sum_{k=1}^{\infty} H_k^2(\mu) \right]_+^p \leq \frac{C(p)}{\alpha^p}. \quad (3.26)$$

and

$$\mathbf{E} \max_{\mu > 0} \left[\sum_{k=1}^{\infty} H_k(\mu)(1 - \xi_k^2) - \alpha \sum_{k=1}^{\infty} H_k^2(\mu) \right]_+^p \leq \frac{C(p)}{\alpha^p}. \quad (3.27)$$

The proof of (3.27) is quite similar to that one of (3.26) and therefore omitted.

3.2.4 Proof of Theorem 7

It follows the main lines of the proof of Theorem 1. Let $\tilde{\alpha}$ be an arbitrary data-driven smoothing parameter. Then we can write

$$\begin{aligned} \|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 &= \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha})Z_k - Z_k + \varepsilon\xi_k]^2 \\ &= \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha}) - 1]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha}) - 1] Z_k \xi_k + \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2 \\ &= \left\{ \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}) \right\} - \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2 \\ &\quad + 2\varepsilon \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha}) - 1] \theta_k \xi_k + 2\varepsilon^2 \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha})(\xi_k^2 - 1). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Notice also that for any $\gamma \in (0,1)$ the estimation error $\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2$ admits the following representation

$$\begin{aligned}
\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 &= (1 - \gamma)\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 + \gamma\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 \\
&= (1 - \gamma)\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 + \gamma \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha})]^2 \xi_k^2 \\
&\quad - 2\gamma \varepsilon \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}) [1 - h_k(\tilde{\alpha})] \theta_k \xi_k \\
&= (1 - \gamma)\|h(\tilde{\alpha})Z - \theta\|^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha})]^2 \\
&\quad + \gamma \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k^2 + \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha})]^2 (\xi_k^2 - 1) \\
&\quad - 2\gamma \varepsilon \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}) [1 - h_k(\tilde{\alpha})] \theta_k \xi_k.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Recalling the definition of $h(\hat{\alpha})$ (see (3.12)), we have that for any given $h(\alpha)$

$$\begin{aligned}
&\left\{ \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\hat{\alpha})]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=1}^n h_k(\hat{\alpha}) \right\} \\
&\leq \left\{ \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 Z_k^2 + 2\varepsilon^2 \sum_{k=1}^n h_k(\alpha) \right\} \\
&\leq R(\theta, h(\alpha)) + \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2 \\
&\quad + 2\varepsilon \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 \theta_k \xi_k + \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 (\xi_k^2 - 1).
\end{aligned}$$

Therefore, combining this inequality with (3.28) and (3.29), we obtain

$$\begin{aligned}
(1 - \gamma)\mathbf{E} \|h(\hat{\alpha})Z - \theta\|^2 \\
\leq R(\theta, h(\alpha)) + \mathbf{E} r_0(\theta, h(\alpha)) + \mathbf{E} r_1(\theta, h(\hat{\alpha})) + \mathbf{E} r_2(h(\hat{\alpha})),
\end{aligned} \tag{3.30}$$

where

$$\begin{aligned} r_0(\theta, h) &= 2\varepsilon \sum_{k=1}^n (1 - h_k)^2 \theta_k \xi_k + \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n (1 - h_k)^2 (\xi_k^2 - 1), \\ r_1(\theta, h) &= -2\varepsilon \sum_{k=1}^n \left\{ 1 - (1 + \gamma)h_k - \gamma h_k^2 \right\} \theta_k \xi_k - \gamma \sum_{k=1}^n (1 - h_k)^2 \theta_k^2, \\ r_2(h) &= \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \left\{ 2h_k - \gamma [h_k]^2 \right\} (\xi_k^2 - 1) - \gamma \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n [h_k]^2. \end{aligned}$$

To bound from above these remainder terms, we apply Lemma 10 and 11. It's easy to see that for any $\gamma \in [0, 1]$, $(1 + \gamma)h_k(\cdot) - \gamma h_k^2(\cdot)$ satisfies (3.22). Therefore with (3.23) we obtain

$$\begin{aligned} \mathbf{E} r_1(\theta, h(\hat{\alpha})) &\leq \mathbf{E} \max_{\alpha} \left[-2\varepsilon \sum_{k=1}^n \left[1 - (1 + \gamma)h_k(\alpha) + \gamma h_k^2(\alpha) \right] \theta_k \xi_k \right. \\ &\quad \left. - \gamma \sum_{k=1}^n \left[1 - (1 + \gamma)h_k(\alpha) + \gamma h_k^2(\alpha) \right]^2 \theta_k^2 \right] + \\ &\quad + \mathbf{E} \max_{\alpha} \left[\gamma \sum_{k=1}^n \left[1 - (1 + \gamma)h_k(\alpha) + \gamma h_k^2(\alpha) \right]^2 \theta_k^2 \right. \\ &\quad \left. - \gamma \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\alpha)]^2 \theta_k^2 \right]_+ \leq \frac{C\varepsilon^2}{\gamma}. \end{aligned} \tag{3.31}$$

In order to control $\mathbf{E} r_2(h(\hat{\alpha}))$, notice that $2x - \gamma x^2$ is a monotone function on $[0, 1]$ for any $\gamma \in [0, 1]$. It means that $[2h_k(\cdot) - \gamma h_k^2(\cdot)] / (2 - \gamma)$ satisfies (3.22), and by Lemma 11 we obtain

$$\begin{aligned} &(2 - \gamma) \mathbf{E} \sum_{k=1}^n \frac{2h_k(\hat{\alpha}) - \gamma [h_k(\hat{\alpha})]^2}{2 - \gamma} (\xi_k^2 - 1) \\ &\quad - \gamma \mathbf{E} \sum_{k=1}^n \left[\frac{2h_k(\hat{\alpha}) - \gamma [h_k(\hat{\alpha})]^2}{2 - \gamma} \right]^2 \\ &\quad + \gamma \mathbf{E} \sum_{k=1}^n \left[\frac{2h_k(\hat{\alpha}) - \gamma [h_k(\hat{\alpha})]^2}{2 - \gamma} \right]^2 - \gamma \mathbf{E} \sum_{k=1}^n [h_k(\hat{\alpha})]^2 \\ &\leq (2 - \gamma) \mathbf{E} \sup_{\alpha > 0} \left\{ \sum_{k=1}^n \frac{2h_k(\alpha) - \gamma [h_k(\alpha)]^2}{2 - \gamma} (\xi_k^2 - 1) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\gamma}{2 - \gamma} \sum_{k=1}^n \left[\frac{2h_k(\alpha) - \gamma [h_k(\alpha)]^2}{2 - \gamma} \right]^2 \right\} \leq \frac{C(2 - \gamma)^2}{\gamma}. \end{aligned} \tag{3.32}$$

Therefore

$$\mathbf{E} r_2(h(\hat{\alpha})) \leq C\varepsilon^2\gamma^{-1}.$$

To finish the proof, it remains to substitute this inequality and (3.31), (3.32) in (3.30) and notice that $\mathbf{E} r_0(\theta, h(\alpha)) = 0$. ■

3.2.5 Proof of Theorem 8

The main idea of the proof is related to the almost obvious fact that the statistics $\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2/n$ provides a good *upper bound* for the unknown noise variance.

Lemma 12 *Let $\tilde{\alpha}$ be an arbitrary data-driven smoothing parameter. Then*

$$\mathbf{E} \left[\varepsilon^2 - \frac{\|h(\tilde{\alpha})Z - Z\|^2}{n} \right]_+ \leq \frac{\sqrt{2}\varepsilon^2}{\sqrt{n}} + \frac{2\varepsilon^2}{n} \mathbf{E} \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}) + \frac{C\varepsilon^2}{n}. \quad (3.33)$$

Proof. We start with the following decomposition:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 - \frac{\|h(\tilde{\alpha})Z - Z\|^2}{n} &= \frac{\varepsilon^2}{n} \sum_{k=1}^n (1 - \xi_k^2) \\ &+ \frac{1}{n} \left[-2\varepsilon \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k \xi_k - \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k^2 \right] \\ &+ \frac{\varepsilon^2}{n} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})] \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

The first term in the right-hand side can be easily bounded since

$$\mathbf{E} \left[\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (\xi_k^2 - 1) \right]^2 = \frac{2}{n}, \quad (3.35)$$

To control the last two remainder terms, we apply Lemma 10 and 11. By (3.24) we immediately get

$$\mathbf{E}_\theta \left[-2\varepsilon \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k \xi_k - \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\tilde{\alpha})]^2 \theta_k^2 \right]_+ \leq C\varepsilon^2. \quad (3.36)$$

Our next step is to control the last term, which can be rewritten as

$$\begin{aligned} & \mathbf{E} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})] \right] \\ &= \mathbf{E} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})]^2 \right] \\ & \quad + \mathbf{E} \left[\frac{1}{4} \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})]^2 - \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})] \right] \end{aligned}$$

Since $2h_k(\alpha) - h_k^2(\alpha)$ with $\alpha = 1/\mu$ satisfies (3.22), we get with the help of Lemma 11

$$\mathbf{E} \sup_{\alpha > 0} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\alpha) - 2h_k(\alpha)](1 - \xi_k^2) - \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n [h_k^2(\alpha) - 2h_k(\alpha)]^2 \right]_+ \leq C$$

and therefore

$$\begin{aligned} & \mathbf{E} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})] \right]_+ \\ & \leq \mathbf{E} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})]^2 \right]_+ \\ & \quad + \mathbf{E} \left[\sum_{k=1}^n [h_k(\tilde{\alpha}) - \frac{1}{2}h_k^2(\tilde{\alpha})]^2 + \sum_{k=1}^n [2h_k(\tilde{\alpha}) - h_k^2(\tilde{\alpha})] \right]_+ \\ & \leq \mathbf{E} \sup_{\alpha \geq 0} \left[\sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})](1 - \xi_k^2) - \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n [h_k^2(\tilde{\alpha}) - 2h_k(\tilde{\alpha})]^2 \right]_+ \\ & \quad + 2\mathbf{E} \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}) \leq C + 2\mathbf{E} \sum_{k=1}^n h_k(\tilde{\alpha}). \end{aligned}$$

Finally, combining this with (3.34)-(3.36), we finish the proof. \blacksquare

Proof of Theorem 8. We prove this theorem with the help of two basic inequalities. The first one follows immediately from Lemma 12. Namely,

$$\mathbf{E} \left[\varepsilon^2 - \frac{\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2}{n} \right]_+ \leq \frac{C\varepsilon^2}{\sqrt{n}} \quad (3.37)$$

which holds true since $\sum_{k=1}^n h_k(\hat{\alpha}) \leq \sqrt{n}$.

The second inequality is quite banal

$$\frac{\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2}{[1 - \|h(\hat{\alpha}_G)\|_1/n]^2} \leq \frac{\|h(\alpha_G^*)Z - Z\|^2}{[1 - \|h(\alpha_G^*)\|_1/n]^2}, \quad (3.38)$$

where

$$\alpha_G^* = \arg \min_{\alpha: \|h(\alpha)\|_1 \leq \sqrt{n}} R(\theta, h(\alpha)).$$

To combine these inequalities, we bound from below the left-hand side of (3.38). Using that $(1-x)^{-2} \geq 1+2x$, $x \in [0,1]$, we immediately get

$$\begin{aligned} \|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 + \frac{2}{n} \|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 \|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 - \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2 \\ \leq \frac{\|h(\alpha_G^*)Z - Z\|^2}{[1 - \|h(\alpha_G^*)\|_1/n]^2} - \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2, \end{aligned}$$

and therefore

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left[\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 + \frac{2}{n} \|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 \|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 - \varepsilon^2 \sum_{k=1}^n \xi_k^2 \right] \\ \leq \frac{R(\theta, h(\alpha_G^*)) - \varepsilon^2 \|h(\alpha_G^*)\|_1/n}{[1 - \|h(\alpha_G^*)\|_1/n]^2} \leq \frac{R(\theta, h(\alpha_G^*))}{[1 - \|h(\alpha_G^*)\|_1/n]^2}. \end{aligned}$$

Next we rewrite this inequality in the following equivalent form :

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 - \varepsilon^2 \mathbf{E} \sum_{k=1}^n \xi_k^2 + 2\varepsilon^2 \mathbf{E} \|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 \\ \leq \frac{R(\theta, h(\alpha_G^*))}{[1 - \|h(\alpha_G^*)\|_1/n]^2} + 2\mathbf{E} \|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 \left[\varepsilon^2 - \frac{\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2}{n} \right]. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Using simple algebra together with (3.31) and (3.32), one can bound from below the left-hand side of the above display as follows :

$$\begin{aligned}
& \mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2 - \varepsilon^2 \mathbf{E} \sum_{k=1}^n \xi_k^2 + 2\varepsilon^2 \mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 \\
&= \mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)Z - \theta\|^2 \\
&\quad + 2\varepsilon \mathbf{E} \sum_{k=1}^n (1 - h_k(\hat{\alpha}_G))\theta_k \xi_k + 2\varepsilon^2 \mathbf{E} \sum_{k=1}^n h_k(\hat{\alpha}_G)(1 - \xi_k^2) \\
&= (1 - \gamma) \mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)Z - \theta\|^2 + \gamma \mathbf{E} \sum_{k=1}^n [1 - h_k(\hat{\alpha}_G)]^2 \theta_k^2 \\
&\quad + 2\varepsilon \mathbf{E} \sum_{k=1}^n [1 - (1 + \gamma)h_k(\hat{\alpha}_G) + \gamma h_k^2(\hat{\alpha}_G)]\theta_k \xi_k \\
&\quad + \varepsilon^2 \mathbf{E} \theta \sum_{k=1}^n [2h_k(\hat{\alpha}_G) - \gamma h_k^2(\hat{\alpha}_G)](1 - \xi_k^2) + \gamma \varepsilon^2 \mathbf{E} \sum_{k=1}^n [h_k(\hat{\alpha}_G)]^2 \\
&\geq (1 - \gamma) \mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)Z - \theta\|^2 - \frac{C\varepsilon^2}{\gamma}.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

The right-hand side of (3.39) can be easily controlled since $\|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 \leq \sqrt{n}$ and it follows immediately from (3.37) that

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)\|_1 \left[\varepsilon^2 - \frac{\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2}{n} \right] &\leq \sqrt{n} \mathbf{E} \left[\varepsilon^2 - \frac{\|h(\hat{\alpha}_G)Z - Z\|^2}{n} \right]_+ \\
&\leq C\varepsilon^2.
\end{aligned}$$

Combining this inequality together with (3.39) and (3.40) we get

$$\mathbf{E}\|h(\hat{\alpha}_G)Z - \theta\|^2 \leq \frac{1}{1 - \gamma} \left[\frac{R(\alpha_G^*, \theta)}{(1 - 1/\sqrt{n})^2} + \frac{C\varepsilon^2}{\gamma} \right],$$

thus completing the proof of this theorem. \blacksquare

Annexe A

Aspects numériques des splines

A.1 Présentation générale de Splines

Aujourd'hui, les splines informatisées sont largement employées dans de différents domaines de l'ingénierie et des mathématiques.

Dans le domaine du design, en construction automobile par exemple, les splines sont utilisées pour approcher des contours complexes. Leur simplicité d'implémentation les rend très populaires et elles sont fréquemment utilisées dans les logiciels de dessin.

Dans le domaine mathématique de l'analyse numérique, une fonction spline est une fonction définie par morceaux par des polynômes.

Dans les problèmes d'interpolation, la méthode des splines est souvent préférée à l'interpolation polynomiale car on obtient des résultats similaires en se servant de polynômes ayant des degrés inférieurs, tout en évitant le phénomène de Runge. Les splines sont considérées comme un outil basique car elles fournissent une technique efficace de lissage.

Étant donnés n points X_i appelés nœuds dans un intervalle $[a, b] : a < X_1 < \dots < X_n < b$. La courbe $\hat{f} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ est appelée spline de degré n si $\hat{f} \in C^{n-1}(a, b)$ et sa restriction sur chaque sous-intervalles $\hat{f}_{[X_i, X_{i+1}]} \in \mathcal{P}_n$, $i = 1, \dots, n-1$ où \mathcal{P}_n est l'ensemble des polynômes de degré n .

En d'autres termes, sur chaque sous-intervalle $[X_i, X_{i+1}]$, $i = 1, \dots, n-1$, \hat{f} est un polynôme de degré n . Les $(X_i, \hat{f}(X_i))$ sont appelés points de contrôle.

Supposons qu'il n'y ait pas de bruits dans le modèle (1.1), alors on connaîtra précisément les valeurs $Y_i = f(X_i)$, $i = 1, \dots, n$, mais on veut reconstruire la fonction $f(X)$ sur l'intervalle $[\min_i X_i, \max_i X_i]$. La solution classique de ce problème est la suivante : sur le plan (X, Y) on trace les points (X_i, Y_i) , $i = 1, \dots, n$ et on pose une pièce de bois (ou de métal) flexible appelée spline passant par tous ces points.

La forme f de cette spline est définie par deux conditions :

- $\hat{f}(X_i) = Y_i$;
- l'énergie de \hat{f} est minimale.

En physique, il est très bien connu que l'énergie de spline est proportionnelle à :

$$\|f''\|^2 \triangleq \int_a^b [f'']^2 dX.$$

C'est pourquoi la spline interpolante est définie par :

$$\hat{f} = \arg \min_{f: f(X_i)=Y_i} \|f''\|^2.$$

S'il y a des bruits, on peut construire une spline en supposant que les points Y_i et la spline se connectent par des ressorts. Dans ce cas, l'énergie des ressorts est donnée par :

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2,$$

tandis que l'énergie de spline est $\|f''\|^2$. Donc l'énergie totale de ce système est :

$$S(f) = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2 + \alpha \|f''\|^2$$

et la spline prend la forme qui minimise cette énergie :

$$\hat{f}_\alpha = \arg \min_f \{S(f)\}.$$

En statistique cette méthode d'estimation est dite *méthodes des moindres carrés pénalisés*.

Le terme $\alpha \|f''\|^2$ nous donne l'information a priori. Il assure que la valeur $S(f)$ d'une certaine courbe ne dépend pas seulement d'un bon ajustement aux observations qualifié par la somme de résidus au carrés $\sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2$ mais aussi par sa pénalité $\|f''\|^2$. Le **paramètre de lissage** α représente le taux de change entre l'erreur résiduelle et la variation locale et nous indique une quantité qui dépend de la somme d'erreurs résiduelles au carré.

Pour une valeur donnée de α , le minimum de $S(f)$ peut réaliser un compromis approprié entre le lissage et l'ajustement. Le choix adaptatif du paramètre de lissage α est un problème essentiel. Il est nécessaire de trouver des méthodes efficaces pour calculer \hat{f}_α et présenter des algorithmes du choix de α .

A.2 Spline Cubique

La fonction spline la plus simple est de degré 1, ce qui correspond à un polygone. La plus couramment utilisée est la spline de degré 3, appelée **spline cubique**. Une

fonction \hat{f}_α sur $[a,b]$ est dite une spline cubique si elle satisfait les deux conditions suivantes :

- \hat{f}_α est un polynôme cubique sur les intervalles (a, X_1) , (X_n, b) et (X_i, X_{i+1}) , $i = 1, \dots, n-1$;
- \hat{f}_α et ses deux premières fonctions dérivées sont continues en chaque X_i , donc elles le sont sur tout l'intervalle $[a,b]$.

En particulier, une spline cubique sur un intervalle $[a,b]$ est dite **spline cubique naturelle (SCN)** si ses dérivées secondes et troisièmes sont nulles aux points a et b . Ces conditions sont appelées les **conditions naturelles aux bords**. Elles impliquent que \hat{f}_α est linéaire sur les deux intervalles extrêmes $[a, X_1]$ et $[X_n, b]$.

Pour faciliter les calculs, on va représenter une SCN en utilisant ses valeurs et ses dérivées secondes aux points X_i , $i = 1, \dots, n$. Cette méthode est appelée la **représentation des valeurs de dérivée seconde**. Supposons que \hat{f}_α est une SCN de nœuds $X_1 < \dots < X_n$ et soient $F_i = \hat{f}_\alpha(X_i)$ et $\gamma_i = \hat{f}_\alpha''(X_i)$, $i = 1, \dots, n$. Par la définition de SCN, les dérivées secondes de \hat{f}_α aux X_1 et X_n sont nulles, donc on a $\gamma_1 = \gamma_n = 0$. On va noter

$$\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_n)^T \quad \text{et} \quad \Gamma = (\gamma_2, \dots, \gamma_{n-1})^T$$

Notons que les composantes γ_i de Γ sont numérotées à la manière non standard, commençant par $i = 2$.

Avec \mathbf{F} et Γ , on peut construire la SCN \hat{f}_α complètement. On va définir d'abord trois matrices supplémentaires Q , R et K . Soit $h_i = X_{i+1} - X_i$, $i = 1, \dots, n-1$.

- Q est une matrice de taille $n \times (n-2)$ de composantes q_{ij} :

$$\begin{aligned} q_{j-1,j} &= h_{j-1}^{-1}, \\ q_{jj} &= -(h_{j-1}^{-1} + h_j^{-1}), \\ q_{j+1,j} &= h_j^{-1}, \\ q_{ij} &= 0, \quad \text{si } |i-j| \geq 2 \end{aligned}$$

Les colonnes de Q sont numérotées comme les composantes de Γ , l'élément supérieur gauche de Q est q_{12} ;

- R est une matrice symétrique de taille $(n-2) \times (n-2)$ de composantes r_{ij} :

$$\begin{aligned} r_{ii} &= \frac{1}{3}(h_{i-1} + h_i), \quad i = 2, \dots, n-1 \\ r_{i,i+1} &= r_{i+1,i} = \frac{1}{6}h_i, \quad i = 2, \dots, n-2 \\ r_{ij} &= 0, \quad \text{si } |i-j| \geq 2 \end{aligned}$$

R est une matrice diagonale strictement dominante, dans le sens que $r_{ii} > \sum_{j \neq i} |r_{ij}|$ pour chaque i . De plus, R est définie positive.

- K est définie par :

$$K = QR^{-1}Q^T.$$

Lemme 1 Les vecteurs \mathbf{F} et Γ définissent une SCN \hat{f}_α si et seulement s'ils satisfont :

$$Q^T \mathbf{F} = R\Gamma.$$

Si cette condition est vérifiée, alors :

$$\|\hat{f}_\alpha''\|^2 = \Gamma^T R\Gamma = \mathbf{F}^T K\mathbf{F}.$$

Preuve. Soit \hat{f}_α une spline cubique définie sur $[a,b]$ et soient X_i , $i = 1, \dots, n$ les nœuds tels que $a < X_1 < \dots < X_n < b$. Puisque $\hat{f}_\alpha \in P_3$ sur les intervalles (a, X_1) , (X_n, b) et (X_i, X_{i+1}) , $i = 1, \dots, n-1$, donc \hat{f}_α'' est linéaire sur ces intervalles. $\forall i = 2, \dots, n$ et $\forall X \in [X_{i-1}, X_i]$:

$$\hat{f}_{\alpha i-1}''(X) = \gamma_{i-1} \frac{X_i - X}{h_{i-1}} + \gamma_i \frac{X - X_{i-1}}{h_{i-1}}. \quad (\text{A.1})$$

En intégrant deux fois, on arrive à :

$$\hat{f}_{\alpha i-1}(X) = \gamma_{i-1} \frac{(X_i - X)^3}{6h_{i-1}} + \gamma_i \frac{(X - X_{i-1})^3}{6h_{i-1}} + c_{i-1}(X - X_{i-1}) + \tilde{c}_{i-1}$$

où les nombres c_{i-1} et \tilde{c}_{i-1} sont déterminés à partir des valeurs $F_i = \hat{f}_\alpha(X_i)$, $i = 2, \dots, n$:

$$c_{i-1} = \frac{F_i - F_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{h_{i-1}}{6}(\gamma_i - \gamma_{i-1}), \quad \tilde{c}_{i-1} = F_{i-1} - \gamma_{i-1} \frac{h_{i-1}^2}{6}.$$

Maintenant, en utilisant la continuité de la dérivée première \hat{f}'_α en X_i , $\forall i = 2, \dots, n$, on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{f}'_\alpha(X_i^-) &= \frac{h_{i-1}}{6}\gamma_{i-1} + \frac{h_{i-1}}{3}\gamma_i + \frac{F_i - F_{i-1}}{h_{i-1}} \\ &= -\frac{h_i}{3}\gamma_i - \frac{h_i}{6}\gamma_{i+1} + \frac{F_{i+1} - F_i}{h_i} = \hat{f}'_\alpha(X_i^+) \end{aligned}$$

où $\hat{f}'_\alpha(X_i^\pm) = \lim_{s \rightarrow 0} \hat{f}'_\alpha(X_i \pm s)$, $\forall i = 2, \dots, n-1$, on en déduit donc que :

$$\begin{aligned} \frac{F_{i+1} - F_i}{h_i} - \frac{F_i - F_{i-1}}{h_{i-1}} &= \frac{1}{6}h_{i-1}\gamma_{i-1} + \frac{1}{3}(h_{i-1} + h_i)\gamma_i + \frac{1}{6}h_i\gamma_{i+1} \\ &= r_{i-1,i}\gamma_{i-1} + r_{ii}\gamma_i + r_{i+1,i}\gamma_{i+1} \end{aligned}$$

où r_{ij} sont les éléments de R . Ce qui revient à écrire :

$$Q^T \mathbf{F} = R\Gamma. \quad (\text{A.2})$$

Supposons que (A.2) est vérifiée, c'est-à-dire $\gamma_1 = \gamma_n = 0$, on va montrer que $\|\hat{f}_\alpha''\|^2 = \Gamma^T R\Gamma = \mathbf{F}^T K\mathbf{F}$. D'après (A.1), $\forall i = 2, \dots, n$ et $\forall X \in [X_{i-1}, X_i]$, on obtient :

$$\int_{X_{i-1}}^{X_i} [\hat{f}_\alpha''(X)]^2 dX = \frac{h_{i-1}}{3}(\gamma_{i-1}^2 + \gamma_{i-1}\gamma_i + \gamma_i^2)$$

donc :

$$\begin{aligned} \|\hat{f}_\alpha''\|^2 &= \sum_{i=2}^{n-1} \frac{h_{i-1}}{3}(\gamma_{i-1}^2 + \gamma_{i-1}\gamma_i + \gamma_i^2) \\ &= \sum_{i=2}^{n-1} \left(\frac{h_{i-1}}{6}\gamma_{i-1} + \frac{h_{i-1} + h_i}{3}\gamma_i + \frac{h_i}{6}\gamma_{i+1} \right) \gamma_i \\ &= \sum_{i=2}^{n-1} \left(\frac{F_{i+1} - F_i}{h_i} + \frac{F_i - F_{i-1}}{h_{i-1}} \right) \gamma_i \\ &= \Gamma^T Q^T \mathbf{F} = \Gamma^T R\Gamma. \end{aligned}$$

On sait que R^{-1} existe et elle est symétrique aussi. Selon (A.2), on a $\Gamma = R^{-1}Q^T \mathbf{F}$, donc $\Gamma^T = \mathbf{F}^T Q(R^{-1})^T = \mathbf{F}^T QR^{-1}$. Ainsi :

$$\|\hat{f}_\alpha''\|^2 = \Gamma^T R\Gamma = \mathbf{F}^T QR^{-1}Q^T \mathbf{F} = \mathbf{F}^T K\mathbf{F}$$

où $K = QR^{-1}Q^T$. ■

A.3 Interpolation par SCN

Ici, on présente le problème d'interpolation par fonctions lisses. Soit $\mathbf{S}[a,b]$ l'espace de toutes les fonctions f sur $[a,b]$, qui ont deux premières dérivées continues. On dit qu'une fonction est lisse si elle appartient à $\mathbf{S}[a,b]$.

Le problème d'interpolation consiste à trouver une fonction $\hat{f}_\alpha \in \mathbf{S}[a,b]$ telle que :

$$z_i = \hat{f}_\alpha(X_i), \quad i = 1, \dots, n$$

qui minimise $\|f''\|^2$ par rapport à $\mathbf{S}[a,b]$.

On sait que la SCN de nœuds X_i appartient à $\mathbf{S}[a,b]$. Le lemme suivant nous donne la SCN qui interpole les valeurs données z_i , $i = 1, \dots, n$.

Lemme 2 *Supposons que $n \geq 2$ et $X_1 < \dots < X_n$. Quelques soient les valeurs z_1, \dots, z_n , il existe une unique SCN \hat{f}_α telle que :*

$$\hat{f}_\alpha(X_i) = z_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Preuve. Soit \mathbf{z} vecteur de composantes z_i . Puisqu'une SCN peut être représentée par ses valeurs et ses dérivées secondes aux nœuds, les conditions $\hat{f}_\alpha(X) = z_i$ seront satisfaites si on prend $\mathbf{F} = \mathbf{z}$. On va définir le vecteur de dérivées secondes par $\Gamma = R^{-1}Q^T\mathbf{F}$. Notons que R^{-1} existe car R est définie positive. D'après le Lemme 1, cette SCN existe car $Q^T\mathbf{F} = R\Gamma$. ■

Dans le Lemme 2, on a mentionné l'unicité et l'existence de la SCN. Pour la complétude mathématique, en donnant un lemme, on démontrera que l'interpolation par SCN est optimale même dans une autre classe de fonctions continues plus grande que $\mathbf{S}[a,b]$.

Soit $\mathbf{S}_2[a,b]$ espace de fonctions différentiables sur $[a,b]$, qui ont la dérivée première absolument continue. Ce qui veut dire que f et f' sont continues et différentiables partout sur $[a,b]$, que f'' existe et que :

$$\int_a^X [f''(t)]dt = f'(X) - f'(a) \quad \forall X \in [a,b].$$

Ces conditions sont satisfaites si f est 2-fois différentiable, donc toutes les fonctions dans $\mathbf{S}[a,b]$ appartiennent à $\mathbf{S}_2[a,b]$.

Le lemme suivant va montrer que l'interpolation par SCN est l'unique qui minimise $\|f''\|^2$ par rapport à la classe $\mathbf{S}_2[a,b]$.

Lemme 3 *Supposons que $n \geq 2$ et \hat{f}_α est la SCN interpolante pour les valeurs z_1, \dots, z_n en points X_1, \dots, X_n , où $a < X_1 < \dots < X_n < b$. Soit \tilde{f} fonction dans $\mathbf{S}_2[a,b]$ telle que $\tilde{f}(X_i) = z_i, i = 1, \dots, n$. Alors :*

$$\|\tilde{f}''\|^2 \geq \|\hat{f}_\alpha''\|^2.$$

On a l'égalité si et seulement si \tilde{f} et \hat{f}_α sont identiques.

Preuve. Soit $h = \tilde{f} - \hat{f}_\alpha \in \mathbf{S}_2[a,b]$. Notons que $h(X_i) = 0, i = 1, \dots, n$. De plus, d'après les conditions naturelles aux bords, \hat{f}_α'' égale zéro en a et b . Donc, l'intégration par partie nous donne :

$$\begin{aligned} \int_a^b \hat{f}_\alpha''(X)h''(X)dX &= - \int_a^b \hat{f}_\alpha'''(X)h'(X)dX \\ &= - \sum_{j=1}^{n-1} \hat{f}_\alpha'''(X_j^+) \int_{X_j}^{X_{j+1}} h'(X)dX \\ &= - \sum_{j=1}^{n-1} \hat{f}_\alpha'''(X_j^+)(h(X_{j+1}) - h(X_j)) = 0. \end{aligned}$$

On a utilisé le fait que \hat{f}_α''' est nulle sur (a, X_1) et (X_n, b) et que cette fonction est égale $\hat{f}_\alpha'''(X_j^+)$ sur l'intervalle (X_j, X_{j+1}) .

Alors, on obtient :

$$\begin{aligned} \|\tilde{f}''\|^2 &= \int_a^b [\hat{f}_\alpha'' + h'']^2 = \|\hat{f}''\|^2 + 2 \int_a^b (\hat{f}_\alpha'' h'') + \|h''\|^2 \\ &= \|\tilde{f}''\|^2 + \|h''\|^2 \geq \|h''\|^2. \end{aligned}$$

Évidemment, on a l'égalité si et seulement si $\|h''\|^2$ vaut zéro donc h est une fonction linéaire sur $[a, b]$, mais puisque h est nulle aux points X_i , $i = 1, \dots, n$, et puisque $n \geq 2$ alors $h = 0$. Ceci revient à dire que \tilde{f} et \hat{f}_α coïncident.

A.4 Lissage par SCN

Dans cette partie, on se mettra dans le cas où $n \geq 3$ pour que les hypothèses du Lemme 1 ne soient pas superflues. Comme précédemment, on suppose que $a < X_1 < \dots < X_n < b$. Notre but consiste à minimiser

$$S(f) = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2 + \alpha \|f''\|^2$$

par rapport à toutes les fonctions f dans $\mathbf{S}_2[a, b]$. Rappelons que α est le paramètre de lissage.

La fonction \hat{f}_α sera définie comme la fonction lisse qui minimise $S(f)$ par rapport à toutes les fonctions f dans $\mathbf{S}_2[a, b]$. On trouvera des propriétés de \hat{f}_α et on présentera la méthode pour calculer \hat{f}_α .

Les propriétés de \hat{f}_α sont :

1. La fonction \hat{f}_α est nécessairement une SCN avec les nœuds X_i , $i = 1, \dots, n$.

Preuve. Supposons que f est une fonction quelconque qui n'est pas SCN. Soit \hat{f}_α la SCN qui interpole les valeurs $f(X_i)$. Par définition, $f(X_i) = \hat{f}_\alpha(X_i)$ pour tout X_i , $i = 1, \dots, n$, alors on a :

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - \hat{f}_\alpha(X_i)]^2 = \sum_{i=1}^n [Y_i - f(X_i)]^2.$$

D'après l'optimalité de SCN (voir le Lemme 3) : $\|f''\|^2 > \|\hat{f}_\alpha''\|^2$ et puisque $\alpha > 0$, \hat{f}_α minimise $S(f)$. On arrive à la conclusion que \hat{f}_α est une SCN. ■

Ce résultat est un avancement très important. Il provient du choix de $\|f''\|^2$ pour pénalité, comme une conséquence mathématique. On peut définir \hat{f}_α précisément en ayant trouvé un nombre fini de constantes. Actuellement, on

doit minimiser $S(f)$ par rapport à une classe de dimension finie de fonctions, les SCN de nœuds aux X_i , au lieu de considérer un ensemble $\mathbf{S}_2[a,b]$ de dimension infinie de fonctions lisses.

2. La fonction \hat{f}_α existe et elle est unique.

Preuve. Soit $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$. Donc on a :

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - \hat{f}_\alpha(X_i)]^2 = (\mathbf{Y} - \mathbf{F})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{F}).$$

De plus, d'après le Lemme 1, on sait que $\|\hat{f}_\alpha''\|^2 = \mathbf{F}^T K \mathbf{F}$. D'où :

$$\begin{aligned} S(f) &= (\mathbf{Y} - \mathbf{F})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{F}) + \alpha \mathbf{F}^T K \mathbf{F} \\ &= \mathbf{F}^T (I + \alpha K) \mathbf{F} - 2 \mathbf{Y}^T \mathbf{F} + \mathbf{Y}^T \mathbf{Y}. \end{aligned}$$

Comme αK est non négative alors $(I + \alpha K)$ est strictement positive. Ainsi :

$$S(f) = \{\mathbf{F} - (I + \alpha K)^{-1} \mathbf{Y}\}^T (I + \alpha K) \{\mathbf{F} - (I + \alpha K)^{-1} \mathbf{Y}\} + M$$

où M est une constante qui ne dépend que de Y . On en déduit que $S(f)$ admet un minimum si on choisit :

$$\mathbf{F} = (I + \alpha K)^{-1} \mathbf{Y}. \quad (\text{A.3})$$

On sait qu'un vecteur \mathbf{F} définit uniquement une spline \hat{f}_α , donc dans l'espace de SCN avec les nœuds X_i , la fonction $S(f)$ a un minimum donné par $S(\hat{f}_\alpha)$ où le \mathbf{F} correspondant est défini par (A.3). ■

Finalement, un résumé des propriétés 1 et 2 se trouve dans le lemme suivant :

Lemme 4 *Supposons que $n \geq 2$ et que le paramètre de lissage α est positif. Alors \hat{f}_α est une SCN telle que $\mathbf{F} = (I + \alpha K)^{-1} \mathbf{Y}$ et pour toute f dans $\mathbf{S}_2[a,b]$, on a $S(\hat{f}_\alpha) \leq S(f)$.*

Ce lemme explicite donne la méthode pour calculer \mathbf{F} , et donc \hat{f}_α . En pratique, la formule (A.3) n'est pas efficace car pour trouver K et $(I + \alpha K)^{-1} K$, il faut inverser deux fois les matrices. Ce qui oblige à un grand nombre de calculs. L'algorithme proposé par Reinsch (1967) permet de calculer la SCN \hat{f}_α très rapidement.

Une **bande matrice** est définie comme une matrice dont les éléments non nuls se concentrent sur une petite partie de ses diagonales. Le nombre de diagonales non nulles est appelé la bande de cette matrice. Si B est une bande matrice de bande $(2k + 1)$, les éléments B_{ij} sont nuls quand $|i - j| > k$.

R et Q étant toutes les deux bande matrices de bande 3. Pour économiser la mémoire d'ordinateur, on applique la **factorisation de Cholesky** : Soit B une

matrice définie positive, symétrique de taille $n \times n$, il est possible d'écrire B sous la forme :

$$B = LDL^T$$

où D est une matrice diagonale d'éléments d_{ii} et L est une matrice triangulaire inférieure dont la diagonale principale vaut 1.

On peut réécrire (A.4) comme suit :

$$(I + \alpha QR^{-1}Q^T)\mathbf{F} = \mathbf{Y}.$$

Cette égalité est équivalente à :

$$\mathbf{F} = \mathbf{Y} - \alpha QR^{-1}Q^T\mathbf{F}.$$

Comme $Q^T\mathbf{F} = R\Gamma$, on obtient :

$$\mathbf{F} = \mathbf{Y} - \alpha Q\Gamma,$$

et en utilisant $Q^T\mathbf{F} = R\Gamma$ de nouveau, on arrive à :

$$Q^T\mathbf{Y} - \alpha Q^TQ\Gamma = R\Gamma.$$

Ce qui nous permet d'exprimer le vecteur Γ en fonction de \mathbf{Y} :

$$(R + \alpha Q^TQ)\Gamma = Q^T\mathbf{Y}.$$

Il est facile de voir que la matrice $(R + \alpha Q^TQ)$ est de bande 5, qu'elle est symétrique et strictement positive. En utilisant la factorisation de Cholesky, on a :

$$R + \alpha Q^TQ = LDL^T,$$

où D est une matrice diagonale d'éléments d_{ii} ; L est une matrice triangulaire inférieure avec $L_{ij} = 0$ quand $j < i - 2$ ou $j > i$; et $L_{ii} = 1, \forall i$.

L'algorithme de Cholesky est bien défini, en effet les matrices mentionnées sont toutes de bande matrices et chaque étape de calculs sera réalisée dans $\mathcal{O}(n)$ opérations numériques.

D'ailleurs, on remarque que toutes les valeurs et toutes les matrices que l'on considère dans l'algorithme de Cholesky ne dépendent pas du choix de l'intervalle $[a, b]$.

Supposons que (a^*, b^*) est une extension de (a, b) , et \hat{f}_α est étendue à (a^*, b^*) par l'extrapolation linéaire sur chaque extrémité. Comme \hat{f}_α'' est nulle hors de (X_1, X_n) donc $\int_a^b [\hat{f}_\alpha'']^2 = \int_{a^*}^{b^*} [\hat{f}_\alpha'']^2$ et $S(\hat{f}_\alpha)$ reste la même. Pour une autre fonction f , si jamais l'extension de la bande d'intégration accroît la valeur $\|\hat{f}_\alpha\|^2$, on verra que \hat{f}_α minimisera $S(f)$ encore.

En fait, si \hat{f}_α est étendue linéairement à $(-\infty, +\infty)$ en chaque extrémité, alors \hat{f}_α va minimiser $S(f)$ sur $\mathbf{S}_2[a, b]$ pour a et b quelconque avec $-\infty \leq a \leq X_1$ et $X_n \leq b \leq +\infty$. Il est intéressant de savoir que l'on peut obtenir une seule spline avec des choix différents d'intervalle. Grâce à ce fait, dans les programmations avec Matlab, on arrive à générer les nœuds seulement entre 0 et 1 sans perdre la généralité.

A.4.1 Trouver les éléments diagonaux de bande matrice

Il existe un algorithme efficace grâce à [15] qui permet de trouver les éléments diagonaux d'une bande matrice. On va appliquer cette méthode dans cette thèse.

Il y a deux composantes importantes de cette méthode. Premièrement, on utilise une méthode générale pour trouver les diagonales centrales de l'inversion d'une bande matrice. Deuxièmement, une nouvelle expression sous la forme matrice chapeau peut être calculée sans inverser des matrices. Les deux parties peuvent être appliquées aux bande matrices arbitraires, mais ici, on ne parle que des cas particuliers de splines lisses où la bande vaut 5.

A.4.2 Diagonales centrales de l'inversion d'une bande matrice

Supposons que B est une bande matrice symétrique de bande 5, c'est-à-dire B_{ij} sont nuls si $|i - j| > 2$. On a besoin d'un algorithme pour déterminer uniquement les cinq diagonales centrales de B^{-1} .

Factorisons B comme $LD^{-1}L^T$, où L est une bande matrice triangulaire inférieure dont la diagonale principale vaut 1, et D est une matrice diagonale d'éléments d_{ii} . Supposons que B^{-1} a les éléments \bar{b}_{ij} , alors, $B^{-1} = L^{-T}D^{-1}L^{-1}$, c'est-à-dire : $L^T B^{-1} = D^{-1}L^{-1}$. Ainsi, on a :

$$B^{-1} = D^{-1}L^{-1} + B^{-1} - L^T B^{-1} = D^{-1}L^{-1} + (I - L^T)B^{-1} \quad (\text{A.4})$$

où L^{-1} et $D^{-1}L^{-1}$ sont des matrices triangulaires inférieures dont leurs diagonales principales respectives valent 1 et d_{ii}^{-1} . De plus, $(I - L^T)$ est une matrice triangulaire supérieure dont la diagonale principale vaut zéro. De (A.4) on déduit que $\forall i = 1, \dots, n - 2$:

$$\begin{aligned} \bar{b}_{ii} &= d_{ii}^{-1} - L_{i+1,i}\bar{b}_{i,i+1} - L_{i+2,i}\bar{b}_{i,i+2}, \\ \bar{b}_{i,i+1} &= -L_{i+1,i}\bar{b}_{i+1,i+1} - L_{i+2,i+1}\bar{b}_{i+1,i+2}, \\ \bar{b}_{ii} &= L_{i+1,i}\bar{b}_{i+2,i+2}. \end{aligned}$$

Notons que B^{-1} est symétrique : $\bar{b}_{ij} = \bar{b}_{ji}$, quand $i > j$, et

$$\bar{b}_{ij} = d_{nn}^{-1}, \bar{b}_{n-1,n} = -L_{n,n-1}\bar{b}_{nn}, \bar{b}_{ij} = d_{n-1,n-1}^{-1} - L_{n,n-1}\bar{b}_{n-1,n}.$$

Donc, on trouve les cinq diagonaux de B^{-1} par l'ordre : (n,n) , $(n-1,n)$, $(n-2,n)$, $(n-1,n-1)$, $(n-2,n-1)$, $(n-3,n-1)$; ... ; $(2,2)$, $(2,1)$, $(1,1)$ et dès que les éléments d_{ii}^{-1} et L_{ij} sont trouvés, tous les éléments \bar{b}_{ij} où $|i - j| \leq 2$ peuvent alors être calculés.

Rappelons que la spline lisse est définie par vecteurs \mathbf{F} et Γ qui satisfont

$$\Gamma = (R + \alpha Q^T Q)^{-1} Q^T \mathbf{Y}$$

et

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \mathbf{Y} - \alpha Q \Gamma = \mathbf{Y} - \alpha Q (R + \alpha Q^T Q)^{-1} Q^T \mathbf{Y} \\ &= \{I - \alpha Q (R + \alpha Q^T Q)^{-1} Q^T\} \mathbf{Y}\end{aligned}$$

où on définit que: $A(\alpha) = I - \alpha Q (R + \alpha Q^T Q)^{-1} Q^T$ et ainsi:

$$I - A(\alpha) = \alpha Q (R + \alpha Q^T Q)^{-1} Q^T.$$

Soit B une bande matrice symétrique notée $(R + \alpha Q^T Q)$ de bande 5 et \bar{b}_{ij} les éléments de B^{-1} . Puisque Q est une matrice tridiagonale, on a $\forall i = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned}(QB^{-1}Q^T)_{ii} &= q_{i,i-1}^2 \bar{b}_{i-1,i-1} + q_{ii}^2 \bar{b}_{ii} + q_{i,i+1}^2 \bar{b}_{i+1,i+1} \\ &\quad + 2q_{i,i-1}q_{ii} \bar{b}_{i-1,i} + 2q_{i,i-1}q_{i,i+1} \bar{b}_{i-1,i+1} + 2q_{ii}q_{i,i+1} \bar{b}_{i,i+1}.\end{aligned}\tag{A.5}$$

On déduit de (A.5) que seul les \bar{b}_{ij} où $|i - j| \leq 2$ sont nécessaires pour trouver les éléments diagonaux de $QB^{-1}Q^T$.

Annexe B

Base de Reinsch-Demmler

On a mentionné, dans Chapitre 3, le fait que la base de Reinsch-Demmler nous permet de calculer le diamètre de Kolmogorov de \mathbb{W}_2^m . Le lemme suivant confirme ce résultat :

Lemme 5 $\{\varphi_k(x), k = 1, \dots, n\}$ est la base de Reinsch-Demmler. ϕ est une base orthonormée quelconque. Soit $D^N(\phi)$ l'erreur maximale d'approximation des fonctions dans \mathbb{W}_2^m telle que :

$$D^N(\phi) = \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[f(X_i) - \sum_{k=1}^N \langle f, \phi_k \rangle \phi_k(X_i) \right]^2 \triangleq \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \|f - f_\phi^N\|_n^2$$

où

$$f_\phi^N(x) = \sum_{k=1}^N \langle f, \phi_k \rangle \phi_k(x),$$

alors :

$$\inf_{\phi} D^N(\phi) = \lambda_{N+1}^{-1}. \quad (\text{B.1})$$

Preuve. Les fonctions $f \in \mathbb{W}_2^m$ peuvent s'écrire comme suit :

$$f(x) = \sum_{k=1}^n \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k(x).$$

On démontre d'abord la borne supérieure de (B.1).

$$\begin{aligned}
 \inf_{\phi} D^N(\phi) &\leq \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \|f - f_{\phi}^N\|^2 \\
 &= \sup_{\|\sum_{k=1}^n \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k^{(m)}\|^2 \leq L} \sum_{k=N+1}^n \langle f, \varphi_k \rangle^2 \\
 &= \sup_{\sum_{k=1}^n \langle f, \varphi_k \rangle^2 \lambda_k \leq L} \sum_{k=N+1}^n \langle f, \varphi_k \rangle^2 \lambda_k \left(\frac{1}{\lambda_k} \right) \\
 &\leq \frac{1}{\lambda_{N+1}} \sup_{\sum_{k=1}^n \langle f, \varphi_k \rangle^2 \lambda_k \leq L} \sum_{k=N+1}^n \langle f, \varphi_k \rangle^2 \lambda_k \leq \frac{L}{\lambda_{N+1}}.
 \end{aligned}$$

Ensuite, pour démontrer la borne inférieure, on définit deux classes de fonctions la base φ :

$$\mathcal{B}^{N+1} = \left\{ f : f = \sum_{k=1}^{N+1} \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k, \quad \lambda_{N+1} \sum_{k=1}^{N+1} \langle f, \varphi_k \rangle^2 \leq L \right\}$$

et

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}^{N+1} &= \left\{ f : f = \sum_{k=1}^{N+1} \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k, \quad \left\| \sum_{k=1}^{N+1} \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k^{(m)} \right\|^2 \leq L \right\} \\
 &= \left\{ f : f = \sum_{k=1}^{N+1} \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k, \quad \sum_{k=1}^{N+1} \lambda_k \langle f, \varphi_k \rangle^2 \leq L \right\}.
 \end{aligned}$$

On voit bien que $\mathcal{B}^{N+1} \subseteq \mathcal{E}^{N+1} \subseteq \mathbb{W}_2^m$, on obtient donc :

$$\inf_{\phi} \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \|f - f_{\phi}^N\|^2 \geq \inf_{\phi} \sup_{f \in \mathcal{E}^{N+1}} \|f - f_{\phi}^N\|^2 \geq \inf_{\phi} \sup_{f \in \mathcal{B}^{N+1}} \|f - f_{\phi}^N\|^2 = \frac{L}{\lambda_{N+1}}. \quad \blacksquare$$

Il faut signaler qu'il est très difficile de trouver la base de Reinsch-Demmler. Pour ceci, on utilise très souvent l'approche asymptotique qui permet de calculer cette base pour n grand. On va considérer le cas le plus simple en supposant que X_i sont *i.i.d.* uniformément distribués sur $[0,1]$. Notre approche se base sur la formule :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g^2(X_i) \approx \int_0^1 g^2(x) dx.$$

Cette formule nous permet de calculer facilement la base $\{\varphi\}$ et les valeurs propres λ_k pour la norme $\mathbb{L}_2(0, 1)$. Sachant que, dans \mathbb{R}^n , il n'y a pas de formule asymptotique pour calculer cette base et ces valeurs λ_k .

On a besoin de quelques définitions. Soit Π^{m-1} un opérateur de projection sur l'espace de tous les polynômes de degré $m - 1$. Soient $\{\psi_i, i = 0, 1, \dots, m - 1\}$ polynômes orthogonaux, ψ_i est de degré $i, i = 0, 1, \dots, m - 1$.

$$\Pi^{m-1}g(x) = \sum_{i=0}^{m-1} \langle g, \psi_i \rangle \psi_i(x).$$

Soit A opérateur tel que :

$$Ag = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 (x-t)_+^{m-1} g(t) dt, \|g\| < \infty.$$

Avec ces notations, on peut représenter $f \in \mathbb{W}_2^m$ comme suit:

$$f(x) = P_f^{m-1}(x) + Ag(x) - \Pi^{m-1}Ag(x)$$

où $P_f^{m-1}(x)$ est un polynôme de degré $m - 1$ et g est une fonction telle que $\|g\| \leq 1$.

En effet, Ag contient des polynômes $\Pi^{m-1}Ag$. Pour faciliter les démonstrations suivantes, on écrit f en deux parties : le polynôme P_f^{m-1} et la partie $(Ag - \Pi^{m-1}Ag)$ qui est orthogonale au polynôme P_f^{m-1} .

On revient à la définition du diamètre kolmogorov :

$$\begin{aligned} d_2^N &= \inf_{\{\phi\}} \sup_{f \in \mathbb{W}_2^m} \|f - f^N\|^2 \\ &= \inf_{\{\phi\}} \sup_{\|g\|^2 \leq 1} \|[P_f^{m-1} + Ag - \Pi^{m-1}Ag] - [P_f^{m-1} + Ag - \Pi^{m-1}Ag]_N^\phi\|^2, \end{aligned}$$

où $[f]_N^\phi = \sum_{k=1}^N \langle f, \phi_k \rangle \phi_k(x)$.

Si on projette f sur la base de polynômes $\{\psi_i, i = 0, 1, \dots, m - 1\}$, la partie de polynômes $P_f^{m-1}(x)$ reste la même et après la soustraction, elle disparaît. Ensuite, $(Ag - \Pi^{m-1}Ag)$ est projetée sur la base $\{\varphi\}$ qui est orthogonale de $\{\psi\}$. Alors :

$$d_2^N = \inf_{\{\varphi\}: \{\varphi\} \perp \{\psi\}} \sup_{\|g\| \leq 1} \|[Ag - \Pi^{m-1}Ag] - [Ag - \Pi^{m-1}Ag]_N^\varphi\|^2.$$

Notons que, $\forall k = 1, \dots, n$, on obtient :

$$\begin{aligned} d_2^N \varphi_k &= (A - \Pi^{m-1}A)^*(A - \Pi^{m-1}A)\varphi_k \\ &= (A^* - A^*\Pi^{m-1})(A - \Pi^{m-1}A)\varphi_k \\ &= A^*(I - \Pi^{m-1})(I - \Pi^{m-1})A\varphi_k \\ &= A^*(I - \Pi^{m-1})A\varphi_k \\ &= A^*A\varphi_k - A^*\Pi^{m-1}A\varphi_k. \end{aligned} \tag{B.2}$$

Par la définition de A , on obtient que son adjoint A^* est donné par :

$$A^*g = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 (t-x)_+^{m-1} g(t) dt,$$

de plus :

$$\frac{d^m A g(x)}{dx^m} = g(x) \quad \text{et} \quad \frac{d^m A^* g(x)}{dx^m} = (-1)^m g(x).$$

On calcule la dérivée m -ème de (B.2) et on arrive à :

$$d_2^N \varphi_k^{(m)} = (-1)^m A \varphi_k - (-1)^m \Pi^{m-1} A \varphi_k. \quad (\text{B.3})$$

On calcule la dérivée m -ième de (B.3), on obtient :

$$d_2^N \varphi_k^{(2m)} = (-1)^m \varphi_k. \quad (\text{B.4})$$

Rappelons que l'on a supposé que $\{\varphi\} \perp \{\psi\}$. Autrement dit :

$$\langle \varphi_k, \psi_j \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1.$$

On obtient les conditions aux bords :

$$\varphi_k^{(l)}(0) = \varphi_k^{(l)}(1) = 0, \quad l = m, m+1, \dots, 2m-1.$$

Lemme 6 *Si une base orthonormée $\{\varphi_k, k = 1, 2, \dots\}$ satisfait :*

1. $(-1)^m \varphi_k^{(2m)} - \mu_k \varphi_k = 0$,
2. $\varphi_k^{(l)}(0) = \varphi_k^{(l)}(1) = 0, \quad l = m, m+1, \dots, 2m-1$, alors on a :

$$\langle \varphi_j^{(m)}, \varphi_k^{(m)} \rangle = \mu_k \delta_{jk}. \quad (\text{B.5})$$

Preuve.

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j^{(m)}, \varphi_k^{(m)} \rangle &= (-1)^m \langle \varphi_j, \varphi_k^{(2m)} \rangle \\ &= (-1)^m \int_0^1 \varphi_j(x) \varphi_k^{(2m)}(x) dx = \mu_k \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle. \end{aligned}$$

On a utilisé l'intégration par partie m fois avec la condition 2 pour arriver à la première inégalité. ■

Ce lemme nous permet de calculer la base $\{\varphi\}$ qui atteint la valeur minimale d_2^N . Ensuite, on va calculer $\{\varphi\}$ pour $m = 1$ et $m = 2$ et on va la tracer pour $m = 2$ en utilisant Matlab.

B.1 Solutions de l'équation différentielle

B.1.1 $m = 1$

On résout l'équation différentielle :

$$\varphi_k'' + \mu_k \varphi_k = 0, \quad \varphi_k'(0) = \varphi_k'(1) = 0, \quad \|\varphi_k\| = 1, \quad \mu_k > 0.$$

$$\varphi_k = C_{1k} \cos(\sqrt{\mu_k}x) + C_{2k} \sin(\sqrt{\mu_k}x),$$

où C_{1k}, C_{2k} sont des constantes. Puisque $\varphi_k'(0) = \varphi_k'(1) = 0$, on en déduit que : $C_{2k} = 0$ et $\mu_k = (k\pi)^2, k \in \mathbb{N}^*$. Finalement, en normalisant φ_k on obtient :

$$\varphi_k = \begin{cases} \sqrt{2} \cos(k\pi x) & k \geq 1; \\ 1 & k = 1. \end{cases}$$

B.1.2 $m = 2$

On résout l'équation différentielle :

$$\varphi_k^{(4)} - \mu_k \varphi_k = 0, \quad \varphi_k''(0) = \varphi_k''(1) = \varphi_k'''(0) = \varphi_k'''(1) = 0, \quad \|\varphi_k\| = 1, \quad \mu_k > 0.$$

La solution de ce problème est donnée par :

$$\varphi_k = C_{1k} e^{u_k x} + C_{2k} e^{-u_k x} + C_{3k} \cos(u_k x) + C_{4k} \sin(u_k x)$$

où $u_k = \sqrt[4]{\mu_k}$ et $C_{1k}, C_{2k}, C_{3k}, C_{4k}$ sont des constantes telles que :

$$\begin{cases} \sin(u_k) C_{2k} = (\cos(u_k) - e^{u_k}) C_{1k} \\ C_{3k} = C_{1k} + C_{2k} \\ C_{4k} = C_{1k} - C_{2k} \end{cases}$$

donc on a :

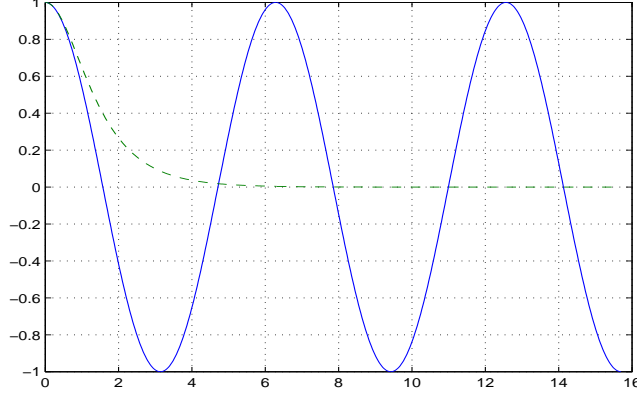
$$\varphi_k(x) = C_{1k} (e^{u_k x} + e^{-u_k(x-1)} + (e^{u_k} + 1) \cos(u_k x) - (e^{u_k} - 1) \sin(u_k x))$$

où u_k satisfait :

$$\cos(u_k) = \frac{2e^{u_k}}{1 + e^{2u_k}} \tag{B.6}$$

On calcule u_k . En utilisant Matlab, on obtient $u_1 \approx 4.73, u_2 \approx 7.8532$ et quand $k \geq 3, u_k \approx (k+1/2)\pi$. En effet, si $k \rightarrow \infty$, on peut approximer (B.6) par l'équation :

$$\cos(u_k) \approx 2e^{-u_k}.$$


 FIG. B.1 – *Graphes de $\cos(x)$ et $2e^x/(1+e^{2x})$*

Ensuite on applique le développement de Taylor de $\arccos(x)$ aux points $(k+1/2)\pi$:

$$u_k = \arccos(2e^{-u_k}) \approx (k + \frac{1}{2})\pi - 2e^{-u_k} \quad \text{où } u \in [k\pi + \frac{\pi}{2} - \varepsilon_k, k\pi + \frac{\pi}{2} + \varepsilon_k]$$

$\varepsilon_k \rightarrow 0$ quand $k \rightarrow \infty$.

On trace les fonctions $\cos(x)$ et $2e^x/(1+e^{2x})$ sur la Fig B.1 pour mieux comprendre ces résultats.

Afin de finir la construction de la base, il faut ajouter deux polynômes orthogonaux qui sont :

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_1(x) = 2\sqrt{3}x - \sqrt{3} \quad \text{ou} \quad \varphi_1(x) = -2\sqrt{3}x + \sqrt{3} \end{cases}$$

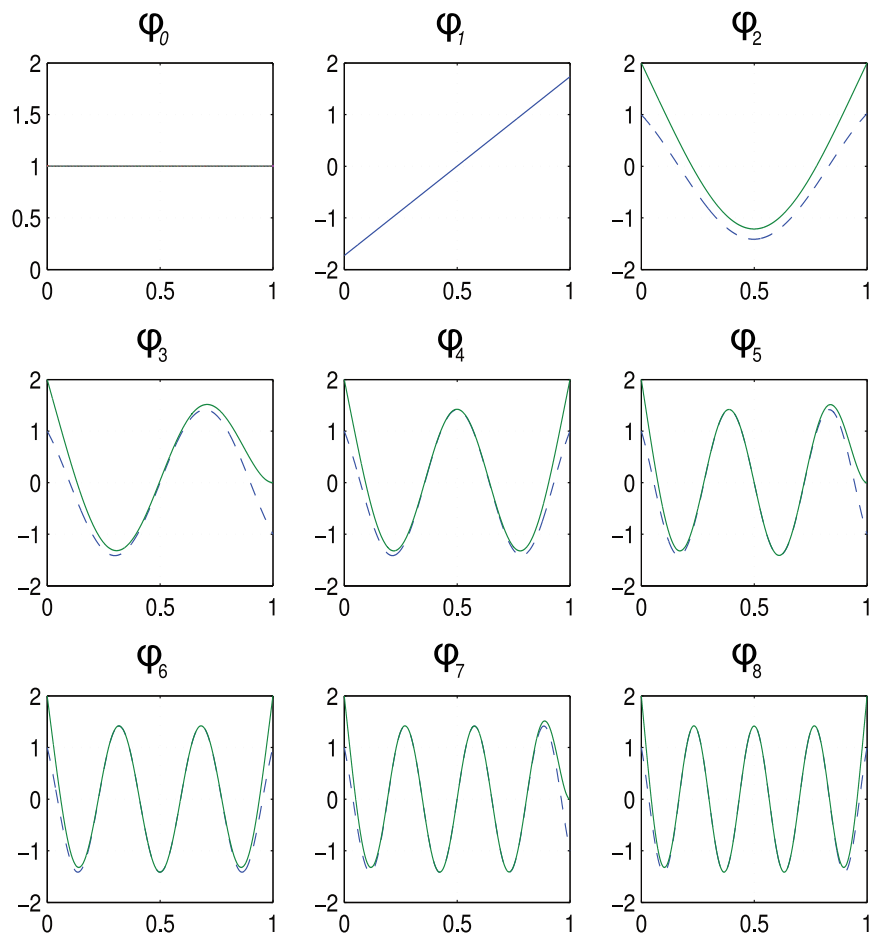
Notons que si $k \rightarrow \infty$, on a :

$$\varphi_k(x) \approx \frac{1}{1+e^{u_k}} \left(e^{u_k x} + e^{-u_k(x-1)} + (e^{u_k} + 1) \cos(u_k x) - (e^{u_k} - 1) \sin(u_k x) \right). \quad (\text{B.7})$$

On peut voir la représentation graphique de cette base sur la Fig B.2. Les lignes continues indiquent les fonctions des base, les lignes en pointilles indiquent la fonction $(\cos(u_k x) - \sin(u_k x))$. On voit que $\{\varphi_k(x)\}$ converge vers $(\cos(u_k x) - \sin(u_k x))$ rapidement. Mais cette convergence n'est pas uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Afin d'expliquer ceci, on récrit (B.7) comme suit :

$$\varphi_k(x) \approx \cos(u_k x) - \sin(u_k x) + \frac{1}{1+e^{u_k}} \left(e^{u_k x} + e^{-u_k(x-1)} + \frac{2(1-e^{2u_k x})}{1+e^{2u_k x}} \right).$$

Quand x est dans les intervalles $[0, (1/u_k)]$ et $[1 - (1/u_k), 1]$, le dernier terme de la formule ci-dessus est assez proche de 1. Par contre, quand $(1/u_k) \ll x \ll 1 - (1/u_k)$, ce terme est presque nul.

FIG. B.2 – *Base de Reinsch-Demmler* $m = 2$

Bibliographie

- [1] H. Akaike (1973), *Information theory and an extension of the maximum likelihood principle*. In: *Proc. 2nd Intern. Symp. Inform. Theory* (P. N. Petrov and F. Csaki, eds.), Budapest, pp. 267–281.
- [2] Barron, A. Birgé, L. and Massart, P. (1999). *Risk bounds for model selection via penalization*. *Probability Theory and Related Fields* **113**, 301–413.
- [3] Birgé, L. and Massart, P. (2001). *Gaussian model selection*. *J. Eur. Math. Soc.* **3**, 203–268.
- [4] Y. Cao and Yu. Golubev (2005), *On oracle inequalities related to polynomial fitting*, *Math. Methods of Stat.*, Volume 14, No.4, 431–450.
- [5] Y. Cao and Yu. Golubev (2006), *On oracle inequalities related to smoothing splines*, *Math. Methods of Stat.*, Volume 15, No.4 398–414.
- [6] Cavalier, L., Golubev, Yu. (2006). *Risk hull method and regularization by projections of ill-posed inverse problems*. *Ann. of Stat.* **34**, No. 4. 1653–1677.
- [7] CUCKER, F., SMALE, S. (2001). *On the mathematical foundations of learning*. *Bulletin of the American Math. Society* **39**, no. 1, 1–49.
- [8] A. Demmler, C. Reinsch (1975), *Oscillation matrices with spline smoothing*, *Numer. Math.* **24**, 375–382.
- [9] Duhamel du Monceau (1752), *Eléments de l'Architecture Navale ou Traité de la Construction des Vaissaux*, Paris.
- [10] R. Eubank (1999), *Nonparametric Regression and Spline Smoothing*, (2nd ed.) New York, Dekker.
- [11] Yu. Golubev and W. Härdle (2002), *On adaptive smoothing in partial linear models*, *Math. Methods. of Stat.*, **11**, 98–117.
- [12] GOLUBEV, YU. (2004). *On the method of empirical risk minimization*. *Probl. Inform. Transm.* no. 2, 21–32.
- [13] GOLUBEV, YU. AND LEVIT, B. (2004). *An oracle approach to adaptive estimation of linear functionals in a Gaussian model*. *Math. Methods of Stat.* 13, no. 4, 392–408.
- [14] P. J. Green and B. W. Silverman (1994), *Nonparametric Regression and Generalized Linear Models. A roughness penalty approach*, Chapman & Hall.
- [15] Hoog, F. D. and Hutchinson, M. (1985). *Smoothing noisy data with spline functions*. *Numer. Math.* 47, 99–106.
- [16] Alexandre B. Tsybakov (2003), *Introduction à l'estimation non paramétrique*, Springer.
- [17] A. Kneip (1994), *Ordered linear smoothers*, *Ann. Stat.* 22, 835–866.
- [18] C. L. Mallows (1973), *Some comments on C_p* . *Technometrics*, 15, 661–675.
- [19] Nemirovski, A (2000). *Topics in non-parametric statistics*. In: *Lectures on Probability Theory and Statistics. Ecole d'Eté de Probabilité de Saint-Flour XXVIII-1998* Springer Verlag Berlin Heidelberg, 85–277.

BIBLIOGRAPHIE

- [20] M. Nussbaum (1985), *Spline smoothing in regression models and asymptotic efficiency in L_2* , Ann. Stat., 13, 984–997.
- [21] M. S. Pinsker (1980), *Optimal filtering of square integrable signals in Gaussian white noise* Problems Inform. Transmission, 16, 120–133.
- [22] R. Shibata, (1981), *An optimal selection of regression variables*, Biometrika, 68, 45–54.
- [23] P. Speckman (1985), *Spline smoothing and optimal rates of convergence in nonparametric regression*, Ann. Stat., 13, 970–983.
- [24] C. M. Stein (1981), *Estimation of the mean of a multivariate normal distribution*, Ann. Statist., 9, 1135–1151.
- [25] V. Tikhomirov (1986), *Fundamental principles of the theory of extremal problems*, John Wiley & Sons.
- [26] A. Van der Vaart and J. Wellner (1996), *Weak convergence and empirical processes*, Springer-Verlag New York.
- [27] G. Wahba (1990), *Spline Models for Observational Data*, S.I.A.M., Philadelphia.

Résumé : Dans cette thèse, on s'intéresse à l'estimation des fonctions de régression par polynômes et par splines dans le cadre des statistiques non-paramétriques. L'objectif est d'estimer la fonction cible f , à partir des observations $Y = f + \epsilon$, où ϵ est un bruit gaussien. En s'appuyant sur la méthode d'estimation du risque sans biais, l'idée consiste à obtenir des inégalités d'oracle pour des familles d'estimateurs par polynômes et par splines. Étant donnée une famille d'estimateurs \mathcal{M} , une telle inégalité permet de comparer, sans aucune hypothèse sur la fonction cible f , les performances de l'estimateur \hat{f}^* à l'estimateur d'oracle \hat{f}_{or} . Le point essentiel de notre approche consiste à sélectionner, à l'aide des données, un paramètre d'estimation adapté : lorsque on considère le problème de l'estimation par projection, ce paramètre est le degré du polynôme ; dans le cas de l'estimation par splines, ce paramètre correspond à un paramètre de lissage. Ainsi, on en déduit des bornes supérieures non-asymptotiques pour les risques quadratiques de notre adaptation.

Afin d'obtenir des inégalités d'oracle, on applique l'inégalité de Doob pour le processus de Wiener pour l'estimation par polynômes ; dans le cas de l'estimation par splines, on introduit le processus ordonné en généralisant le processus de Wiener.

Abstract : In this thesis, we study some aspects of the non-parametric regression functions estimation. Our purpose is to estimate an unknown function f from the given data $Y = f + \epsilon$, where ϵ is a Gaussian noise. We consider an approach based on the unbiased risk estimation, and we obtain oracle inequalities for polynomial and splines estimators families. Given an estimators family \mathcal{M} , such an inequality allows to compare the performances of an adaptive estimator \hat{f}^* to the oracle estimator \hat{f}_{or} . The very core of our approach is related to data-driven methods for choosing a degree of the fitting polynomial and a smoothing spline parameter. , we provide non-asymptotic upper bounds for the mean square risk of fitting.

In order to obtain the oracle inequalities, we use the Doob inequality for the Wiener process in polynomial fitting and introduce a more general notion of the Wiener process, ordered process, in the case of the spline estimation.