



HAL
open science

Plans d'expérience optimaux en régression appliquée à la pharmacocinétique

Mohamad Belouni

► **To cite this version:**

Mohamad Belouni. Plans d'expérience optimaux en régression appliquée à la pharmacocinétique. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Grenoble, 2013. Français. NNT : 2013GRENM056 . tel-01167542

HAL Id: tel-01167542

<https://theses.hal.science/tel-01167542v1>

Submitted on 24 Jun 2015

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.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Mohamad BELOUNI

Thèse dirigée par **Karim BENHENNI**

préparée au sein du **Laboratoire Jean Kuntzmann**
et de l'**Ecole Doctorale Mathématiques, des Sciences et Technologies**
de l'**Information et de l'Informatique**

Plans d'expérience optimaux en régression appliquée à la pharmacocinétique

Thèse soutenue publiquement le, **9 octobre 2013**,
devant le jury composant de:

M. Yingcai SU

Professeur, Missouri State University, USA , Rapporteur

Mme. Delphine BLANKE

Professeur, Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, Rapporteur

M. Jérôme SARACCO

Professeur, Université Bordeaux 1 , Examineur

M. Jacques ISTAS

Professeur, Université Pierre-Mendès-France, Examineur

Mme. Florence FORBES

Directeur de Recherche, INRIA Grenoble Rhone-Alpes, Présidente

M. Karim BENHENNI

Maître de Conférences- HDR, Université Pierre-Mendès-France, Directeur de thèse



Remerciements

Je tiens à remercier très sincèrement mon directeur de thèse, le Professeur Karim BENHENNI, pour tout le temps qu'il a bien voulu me consacrer pour la préparation de cette thèse. Il m'a fourni de très nombreuses explications, que ce soit sur des problèmes théoriques ou de calcul, et une grande aide pour la mise au point des différentes parties de ma thèse. Ses encouragements tout au long de ces années et son guidage éclairé de mes errances mathématiques m'ont été très précieux.

Je voudrais ensuite remercier les membres de mon jury, en particulier les Professeurs Yingcai SU et Delphine BLANKE, pour avoir bien voulu rapporter sur cette thèse, pour leur lecture attentive du mémoire et la pertinence de leurs commentaires. Je remercie aussi les Professeurs Jérôme SARACCO, Jacques ISTAS et Florence FORBES qui me font le grand honneur de participer à mon jury de soutenance et l'intérêt qu'ils ont apporté à ce travail.

Par ailleurs, Je tiens à remercier le directeur du laboratoire Jean Kuntzmann, Eric BONNETIER, pour son aide tout au long de mes études de Master Recherche en Mathématiques appliquées et tous les membres de ce laboratoire pour m'avoir accueilli au sein de cette structure.

Je remercie mes amis et proches qui m'ont soutenu durant cette aventure.

Enfin, je ne saurais terminer cette partie sans exprimer ma gratitude à ma femme, mes parents, mes frères et mes soeurs qui m'ont toujours soutenu, encouragé pendant mes études.

Plans d'expérience optimaux en régression appliquée à la pharmacocinétique.

Résumé

Le problème d'intérêt est d'estimer la fonction de concentration et l'aire sous la courbe (AUC) à travers l'estimation des paramètres d'un modèle de régression linéaire avec un processus d'erreur autocorrélé. On construit un estimateur linéaire sans biais simple de la courbe de concentration et de l'AUC. On montre que cet estimateur construit à partir d'un plan d'échantillonnage régulier approprié est asymptotiquement optimal dans le sens où il a exactement la même performance asymptotique que le meilleur estimateur linéaire sans biais (BLUE). De plus, on montre que le plan d'échantillonnage optimal est robuste par rapport à la misspecification de la fonction d'autocovariance suivant le critère du minimax. Lorsque des observations répétées sont disponibles, cet estimateur est consistant et a une distribution asymptotique normale. Les résultats obtenus sont généralisés au processus d'erreur de Hölder d'indice $0 < \alpha < 2$. Enfin, pour des tailles d'échantillonnage petites, un algorithme de recuit simulé est appliqué à un modèle pharmacocinétique avec des erreurs corrélées.

Mots clés : Courbe de concentration, AUC, modèle linéaire, erreurs corrélées, plans d'échantillonnage optimaux, estimateurs linéaires optimaux, critère du minimax, normalité asymptotique, processus höldérien, algorithmes d'optimisation, pharmacocinétique.

Optimal sampling designs for regression applied to pharmacokinetic..

Abstract

The problem of interest is to estimate the concentration curve and the area under the curve (AUC) by estimating the parameters of a linear regression model with autocorrelated error process. We construct a simple linear unbiased estimator of the concentration curve and the AUC. We show that this estimator constructed from a sampling design generated by an appropriate density is asymptotically optimal in the sense that it has exactly the same asymptotic performance as the best linear unbiased estimator (BLUE). Moreover, we prove that the optimal design is robust with respect to a misspecification of the autocovariance function according to a minimax criterion. When repeated observations are available, this estimator is consistent and has an asymptotic normal distribution. All those results are extended to the error Hölder process with index $0 < \alpha < 2$. Finally, for small sample sizes, a simulated annealing algorithm is applied to a pharmacokinetic model with correlated errors.

Key words : Concentration curve, AUC, linear model, correlated errors, optimal sampling designs, optimal linear estimators, minimax criterion, asymptotic normality, hölderien process, optimization algorithms, pharmacokinetics.

Publications scientifiques

1. Belouni, M. et Benhenni, K. (2012), Plans d'expérience pour l'estimation de la courbe de concentration et de l'AUC.
" *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris (CRAS)*", Volume 350, Issue 13, Pages 707-710, juillet 2012.
2. Belouni, M. et Benhenni, K. (2012), Optimal and robust designs for estimating the concentration curve and the AUC, octobre 2012. *Soumis*.
3. Belouni, M. et Benhenni, K. (2012), Plans d'expérience pour l'estimation de la courbe de concentration et de l'AUC.
Acte aux "*44ème Journées de Statistique*", Bruxelles (Belgique), Mai 21-25, 6 pages.

Présentations aux congrès nationaux et séminaires

1. "Echantillonnage optimal et robuste en régression linéaire avec un processus d'erreur Höldérien".
Contribution aux "*Cinquièmes Rencontres des Jeunes Statisticien-ne-s*", France (au centre Paul Langevin du CNRS à Aussois (Savoie)), août 26-30, 2013.
2. "Plans d'expérience optimaux en régression appliquée à la pharmacocinétique".
Journée de rentrée des doctorants du département Probabilités-Statistique du LJK (20 novembre 2012) .
3. "Plans d'expérience pour l'estimation de la courbe de concentration et de l'AUC".
Contribution aux "*44ème Journées de Statistique*", Bruxelles (Belgique), Mai 21-25, 2012.
4. "Plans d'expérience pour l'estimation de la courbe de concentration et de l'AUC".
Présentation d'un poster à la réunion de rentrée annuelle (2012) du Laboratoire Jean Kuntzmann (LJK), 6 octobre 2011

Table des matières

Introduction générale	7
1 Estimation de la fonction de concentration et de l'AUC	13
1.1 Définition du modèle et plans d'échantillonnage	13
1.2 Modèle paramétrique et hypothèses	14
1.3 Estimation optimale des coefficients de régression et plans d'échantillonnage optimaux	16
1.4 Estimateur simple sans biais et plans d'échantillonnage opti- maux	19
1.5 Forme générale de la fonction de régression	24
1.6 Exemples	26
1.6.1 Modèle linéaire	27
1.6.2 Modèle quadratique	30
1.7 Plans d'échantillonnage optimaux selon le critère du Minimax	32
1.8 Preuves des résultats	33
1.8.1 Preuve de la Proposition 1.4.1	33
1.8.2 Preuve du Théorème 1.4.2	34
1.8.3 Preuve du Théorème 1.5.1	47
1.8.4 Preuve du Théorème 1.7.1	49
2 Plans d'expérience pour le modèle de régression multiple	51
2.1 Estimation paramétrique de l'AUC et plans d'échantillonnage optimaux	51
2.2 Distribution asymptotique	60
2.3 Preuves des résultats	62
2.3.1 Preuve de la Proposition 2.1.1	62
2.3.2 Preuve du Théorème 2.1.2	63
2.3.3 Preuve du Théorème 2.1.3	67
3 Extensions aux processus stationnaires de Hölder	70
3.1 Processus de Hölder	70
3.2 Modèle de régression simple	71
3.3 Forme générale de la fonction de régression	76
3.4 Exemple	79
3.5 Plans d'échantillonnage optimaux selon le critère du Minimax	81
3.6 Modèle de régression multiple	81
3.7 Preuves des résultats	86

TABLE DES MATIÈRES

3.7.1	Preuve du Théorème 3.2.1	86
3.7.2	Preuve du Théorème 3.5.1	102
3.7.3	Preuve du Théorème 3.6.1	103
3.7.4	Preuve du Théorème 3.6.2	109
4	Application à la pharmacocinétique	113
4.1	Modèle de concentration	113
4.2	Fonction objective	114
4.3	Plans d'expérience optimaux	116
4.3.1	Erreurs non corrélées avec variance constante	116
4.3.2	Erreurs non corrélées avec variance non constante	117
4.3.2.1	Principe de la méthode de Descente de Gradient	119
4.3.2.2	Plan d'expérience optimal selon l'algorithme Descente de Gradient	121
4.3.2.3	Comparaison du plan selon l'algorithme Descente de Gradient et du plan conventionnel	123
4.3.2.4	Principe de l'algorithme Recuit Simulé	124
4.3.2.5	Comparaison du plan selon l'algorithme Recuit Simulé et des plans Conventionnel et Uniforme	126
4.3.2.6	Comparaison des plans selon l'algorithme Descente de Gradient et l'algorithme Recuit Simulé	127
4.3.3	Erreurs corrélées avec variance non constante	128
5	Perspectives	131
5.1	Plans d'échantillonnage optimaux pour l'estimation non-paramétrique de la fonction de concentration et de l'AUC	131
5.2	Méthodes algorithmiques	133
	Bibliographie	134
	Annexes	140

Introduction générale

Le problème de la détermination des plans d'expérience optimaux exactes a trouvé un intérêt considérable pour l'étude de modèles statistiques avec des observations indépendantes [voir par exemple Hohmann et Jung (1975), Gaffke et Krafft (1982), Imhof (1998, 2000), Imhof, Krafft et Schaefer (2000)]. Le problème de plans d'expérience optimaux pour l'estimation du paramètre dans une régression linéaire lorsque les erreurs sont non corrélées a été examiné par le travail de pionnier de Atkinson (1970) et le problème a ensuite été repris par de nombreux autres auteurs [voir par exemple Ott et Mendenhall (1972), Murthy et Studden (1972), Myres et Lahoda (1975), Hader et Park (1978), Mukerjee et Huda (1985), Mandal et Heiligers (1992), Pronzato et Walter (1993), Melas et al. (2003), Dette et al. (2010)]. Si l'estimation du paramètre de régression est l'objectif principal de l'expérience, il existe de nombreux critères d'optimalité proposées dans la littérature, qui peuvent être utilisés pour la détermination de plans efficaces [voir, par exemple Silvey (1980) ou Pukelsheim (1993)]. Dans presque tous les cas d'intérêt pratique, des plans optimaux doivent être déterminés numériquement à travers des algorithmes appropriés [voir par exemple Müller (1995), Dette et al. (2003) et Dette et Braess (2007)]. De nombreux résultats théoriques assez complets pour la construction de plans optimaux pour des erreurs non corrélées sont disponibles dans la littérature [voir par exemple les monographies de Fedorov (1972), Silvey (1980), Pázman (1986), Atkinson et Donev (1992)], Atkinson, Donev et Tobias (2007) ou Pukelsheim (1993)].

La détermination des plans d'expérience optimaux pour les modèles avec une structure d'erreur corrélée est sensiblement plus difficile et pour cette raison pas très bien développé. La difficulté dans le développement de la théorie des plans optimaux pour les observations corrélées peut s'expliquer par le fait que les plans d'expérience optimaux ont une structure extrêmement complexe et très difficile à trouver, même dans les cas simples.

Le premier travail traitant du problème de plan optimal pour un modèle de régression linéaire avec observations corrélées est l'œuvre de Hoel (1958), qui considère l'estimation du paramètre de régression par la moyenne pondérée des moindres carrés, mais restreinte à une classe de plans équidistants. Bickel et Herzberg (1979) et Bickel et al. (1981) ont considéré l'estimation des moindres carrés du paramètre de la régression linéaire simple et ont déterminé asymptotiquement (lorsque la taille de l'échantillon augmente) des plans optimaux. Par ailleurs, la structure de corrélation des erreurs n'est pas utilisée dans la construction de leur estimateur.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Abt, Liski, Mandal et Sinha (1997, 1998) ont déterminé des plans optimaux parmi les plans équidistants respectivement pour le modèle de régression linéaire et quadratique avec la structure d'erreur autocorrélée. Müller et Pazman (2003) ont déterminé un algorithme pour la recherche de plans optimaux approximatifs pour le problème de régression linéaire avec erreurs corrélées. Dette et al. (2006) ont considéré des plans D-optimaux exactes (en minimisant le déterminant de l'inverse de la matrice de l'information de Fisher) pour l'analyse des moindres carrés pondérée dans le modèle de régression linéaire et quadratique avec un processus d'erreur autoregressif.

Pour la structure d'erreur de dépendance à longue mémoire, Dette et al. (2009) a examiné des plans asymptotiques optimaux dans les modèles de régression et les a comparé avec les plans d'échantillonnage optimaux pour des processus d'erreur à courte mémoire. Certains problèmes de plans d'expérience optimaux exactes (pour une taille d'échantillonnage fixée) ont été étudiés dans Boltze et Näther (1982), Näther (1985a, Ch. 4), Näther (1985b), voir aussi Pázman et Müller (2001), Müller et Pázman (2003). Il existe également une vaste littérature sur les plans d'expérience optimaux pour des modèles avec erreurs corrélées lorsque la variance-covariance structure ne dépend pas du plan choisi. C'est généralement le cas pour les modèles d'analyse de la variance (ANOVA), voir e.g. Martin (1996), mais aussi des articles traitant des modèles de régression, voir e.g. Bischoff (1995). Les résultats les plus élégants dans ce domaine ont été obtenus dans une série d'articles initiés par Sacks et Ylvisaker (1966), dont l'approche est asymptotique en ce sens qu'un plan d'échantillonnage est dit optimal lorsqu'il est aussi performant que le meilleur plan d'échantillonnage pour des tailles suffisamment grandes. Une autre suggestion remonte à Brimkulov et al. (1980), et plus récemment par Pazman et Müller (2000).

Dans beaucoup de situations expérimentales, telles que les études de la validité biologique, et en particulier dans les problèmes de la pharmacocinétique, où on étudie l'action des médicaments et leur emploi thérapeutique, on a souvent recours au calcul d'aire à partir d'un ensemble d'observations de mesures. Au cours de l'admission d'une dose à un agent pharmacologique, on estime l'aire sous la courbe (concentration - temps), au vu de l'observation d'un échantillon de mesures accompagnées d'erreurs aléatoires. Pour une fonction de concentration, qui peut changer selon que le médicament est administré par voie orale ou intraveineuse, on cherche à déterminer un plan d'échantillonnage optimal pour un intervalle de temps fixé. L'aire engendrée par cet échantillonnage doit approcher au mieux l'aire sous la courbe de concentration. L'aire sous la courbe de concentration (intégrale de la fonction de concentration sur l'intervalle de temps) est proportionnel à la biodisponibilité (connues en littérature anglo-saxonne sous l'initial BA) du médicament administré. La biodisponibilité est définie par la quantité de médicament qui atteint la circulation sanguine après administration extravasculaire et par la vitesse de ce phénomène, qui dépend de la vitesse d'absorption à partir du site d'administration. En général, la pharmacocinétique est l'étude de l'absorp-

INTRODUCTION GÉNÉRALE

tion, de la distribution, du métabolisme et de l'élimination des médicaments dans des organismes divers. Son objectif est l'optimisation des schémas thérapeutiques. Il est ainsi possible de définir la posologie, la fréquence et la voie d'administration qui permettront d'atteindre, chez un malade donné, des concentrations sanguines en principe actives et efficaces tout en minimisant la survenue d'effets indésirables.

En ce qui concerne les études individuelles de pharmacocinétique (connues en littérature anglo-saxonne sous l'initial PK), plusieurs approches ont été proposées pour trouver les points d'échantillonnage optimaux du temps. Atkinson et al. (1993) ont proposé une méthode d'optimisation en utilisant un critère de D-optimalité pour des paramètres comme l'aire sous la courbe de concentration (AUC), la concentration maximale du médicament (C_{max}) et le temps associé (t_{max}). Katz et D'Argenio (1983) ont proposé un algorithme qui utilise l'erreur quadratique moyenne (EQM) de l'estimation de l'AUC comme une fonction objective pour trouver les temps d'échantillonnage optimaux. Le but est de minimiser cette fonction objective par rapport aux temps d'échantillonnage afin de sélectionner le plan d'échantillonnage optimal. Wang (2001) a aussi utilisé le critère EQM pour estimer la courbe de concentration qui dépend du temps à travers une interpolation linéaire et déduire ainsi l'estimation de l'AUC. Kong et Gonin (2000) ont aussi construit leur fonction objective comme étant l'erreur d'interpolation linéaire, mais en utilisant le carré du biais plutôt que l'EQM. L'algorithme Recuit Simulé (ARS) a été appliqué avec parcimonie dans ce domaine avec quelques exceptions notables. Par exemple, Jones et Wang (1999), Duffull et al. (2002) ont introduit l'ARS pour trouver des points d'échantillonnage du temps avec des modèles utilisés en PK et également un critère de D-optimalité. En outre, ils ont comparé l'ARS avec plusieurs autres algorithmes d'optimisation.

Il existe deux principales approches pour estimer les AUC dans les études PK : modèles paramétriques et modèles non paramétriques. Dans le modèle paramétrique, on estime d'abord les paramètres des modèles utilisés en PK, puis on intègre un "plug-in" estimation de la courbe de concentration du temps. On rappelle au lecteur le livre de Davidian et Giltinan (1995) pour plus de renseignements sur les modèles PK. Pour éviter les problèmes de mauvaise spécification du modèle, les approches non paramétriques sont plus communément utilisées pour estimer les AUC dans les études PK que les approches de modélisation paramétrique PK. On étudie le choix optimal des points d'échantillonnage du temps en utilisant la règle des trapèzes pour estimer l'AUC.

La règle des trapèzes est une règle de quadrature numérique qui est l'estimation non paramétrique la plus commune de l'aire sous la courbe de la concentration du médicament qui dépend du temps. Ce choix est très bien fondé, car cette règle donne en général une bonne approximation de l'AUC lorsque la fonction de concentration diminue de façon exponentielle. Baier

INTRODUCTION GÉNÉRALE

and Piegorsch (1990) ont comparé plusieurs méthodes de quadrature numérique pour approcher l'AUC en utilisant le critère EQM comme une fonction objective. Ils ont constaté que la règle des trapèzes a engendré un écart relativement plus petit entre l'AUC et son estimation.

Tous les travaux mentionnés dans cette introduction sur la pharmacocinétique supposent que les observations sont indépendantes et donc que les erreurs sont non corrélées. La corrélation des erreurs peut avoir des conséquences importantes sur les propriétés statistiques des estimateurs des paramètres du modèle PK et de l'AUC, ainsi que sur le choix optimal du plan d'échantillonnage. L'objectif de cette thèse consiste donc en l'étude des plans d'échantillonnage optimaux pour l'estimation paramétrique de la fonction de concentration et de l'AUC, lorsqu'on est en présence de corrélation des erreurs.

Dans ce mémoire le modèle mathématique qu'on étudie est la somme de la fonction de régression $g(t)$ (la fonction de concentration) définie dans un intervalle d'observation $[t_{n,0}, t_{n,n}]$ et une erreur additive $\varepsilon(t)$. Les erreurs engendrées sont corrélées et forment un processus aléatoire autocorrélé avec une moyenne nulle et une fonction d'autocovariance connue. On suppose que $t_{n,0}$ et $t_{n,n}$ sont fixés, et on s'intéresse au choix des points intermédiaires $\{t_{n,1}, \dots, t_{n,n-1}\}$ pour l'estimation de la fonction de concentration et de la surface sous la courbe de concentration (AUC). On définit ensuite l'estimateur linéaire de cette surface et enfin, on sélectionne les temps d'observations $\{t_{n,1}^*, \dots, t_{n,n-1}^*\}$ qui minimisent l'erreur quadratique moyenne (EQM).

Plus précisément, on organise notre travail de la façon suivante :

Aux chapitres 1 et 2, le problème d'intérêt est d'estimer la fonction de concentration $g(t)$ et l'AUC de g notée par $AUC(g)$ à travers l'estimation des paramètres d'un modèle de régression linéaire. L'estimateur est construit à partir d'observations en un nombre fini de points d'un plan d'échantillonnage de manière appropriée lorsque le processus d'erreur prend des valeurs corrélées. La performance d'un estimateur est mesurée par son erreur quadratique moyenne (EQM). Les points d'échantillonnage qui minimisent l'EQM forment un plan d'échantillonnage optimal, qui est généralement difficile à engendrer. Pour contourner cette difficulté, Sacks et Ylvisaker (1966) ont proposé une approche asymptotique et ont montré que les plans d'échantillonnage réguliers, qui sont déterminés par un bon choix de la densité d'échantillonnage, sont asymptotiquement optimaux lorsque le meilleur estimateur linéaire sans biais (BLUE) est utilisé et lorsque le processus d'erreur n'est pas régulier. On donne les hypothèses nécessaires pour énoncer nos résultats théoriques. On suppose, en particulier, que le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ n'a aucune dérivée en moyenne quadratique mais que sa fonction d'autocovariance $R(t, s)$ est supposée avoir des dérivées partielles à gauche et à droite sur la

INTRODUCTION GÉNÉRALE

diagonale et que la fonction de saut $\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+)$ est strictement positive. Pour le problème d'estimation des coefficients de régression, Su et Cambanis (1993) ont défini des estimateurs simples construits à partir d'un plan d'échantillonnage médian modifié mais complexe. Les estimateurs simples obtenus sont encore biaisés mais asymptotiquement optimaux. Les estimateurs BLUE de $g(t)$ et de l'AUC dépendent de l'inverse de la matrice d'autocovariance et par conséquent manquent de stabilité et de robustesse. Dans ce travail, on construit des estimateurs simples et stables qui ne dépendent pas de cette matrice et qui utilisent seulement les observations aux points d'un plan d'échantillonnage non modifié engendré par une densité positive appropriée. On montre que sous certaines hypothèses sur la fonction d'autocovariance du processus d'erreur, ces estimateurs sont sans biais et ont la même performance asymptotique que les estimateurs BLUE et sont donc asymptotiquement optimaux. On montre aussi que le plan d'échantillonnage optimal est robuste par rapport à la misspecification de la fonction d'autocovariance suivant le critère du minimax. On considère comme exemples les processus d'erreur stationnaire d'Ornstein - Uhlenbeck et non stationnaire de Mouvement Brownien, afin de comparer les performances des estimateurs BLUE et des estimateurs simples ainsi que les plans d'échantillonnage optimaux et uniformes en fonction de la taille de l'échantillonnage. Finalement, en considérant un modèle de régression linéaire multiple avec N unités expérimentales indépendantes, ayant chacune $n + 1$ mesures de la réponse, on construit des estimateurs simples sans biais du vecteur paramètre β du modèle et de l'AUC. Ensuite, on montre que ces estimateurs sont consistants quand le nombre d'unités expérimentales est suffisamment grand. On établit la normalité asymptotique de ces estimateurs puis on donne les intervalles de confiance pour les composantes du vecteur paramètre β et de l'AUC.

Au chapitre 3, on utilise les mêmes estimateurs qu'on a construits aux chapitres 1 et 2 pour l'estimation de la fonction de concentration et de l'AUC à travers le modèle de régression linéaire mais en supposant que le processus d'erreur est stationnaire et Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$. Plus précisément, on suppose que la fonction d'autocovariance du processus d'erreur $\{\varepsilon(t), t \in [0, 1]\}$ a des dérivées fractionnaires d'ordre α , $0 < \alpha < 2$, à gauche et à droite de 0 et que la fonction de saut fractionnaire $\lambda_\alpha = R^{(\alpha)}(0-) - R^{(\alpha)}(0+) = 2R^{(\alpha)}(0-) = -2R^{(\alpha)}(0+)$ est strictement positive. Pour $0 < \alpha \leq 1$, on montre que la vitesse de convergence optimale de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur des trapèzes est d'ordre $n^{-(1+\alpha)}$ avec une constante asymptotique qui dépend de la fonction Zêta de Riemann. Par contre, lorsque $1 < \alpha < 2$, on montre que la vitesse de convergence est plus rapide que n^{-2} . Le plan d'échantillonnage optimal dépend de l'indice α mais reste néanmoins robuste par rapport au critère du Minimax. On conclut ce chapitre par un exemple correspondant à $\alpha = 1/2$ pour confirmer les résultats théoriques obtenus.

Au chapitre 4, pour des tailles d'échantillonnage petites, on donne un

INTRODUCTION GÉNÉRALE

exemple d'application à la pharmacocinétique où on définit le modèle de concentration par un modèle tri-exponentiel représentant la concentration de la digoxine dans le plasma (ng/ml), sachant que le temps est mesuré en heures sur une période de 0 à 96 heures. Puis, on donne les plans d'expérience optimaux en distinguant deux cas, le premier cas concerne des erreurs non corrélées et de variance non constante et le deuxième cas concerne des erreurs corrélées et de variance non constante où on considère, en particulier, un processus d'erreur d'Ornstein - Uhlenbeck. Suivant les cas, on présente les plans d'expériences optimaux selon la méthode Descente de Gradient, la méthode Recuit Simulé, la méthode uniforme et la méthode conventionnelle; et on compare ces méthodes à travers l'erreur quadratique moyenne et l'erreur d'approximation.

Comme perspective, on a ajouté **le chapitre 5** qui sera consacré aux plans d'échantillonnage pour l'estimation non-paramétrique de la fonction de concentration et de l'aire sous la courbe de concentration (AUC). On utilisera d'abord un estimateur à noyaux du type Gasser et Müller (1984) de la courbe de concentration, on approximera ensuite l'aire sous cette courbe. Dans un premier temps, on étudiera analytiquement le plan d'échantillonnage optimal lorsque la taille de l'échantillon est suffisamment grande ($n \rightarrow \infty$). Dans un deuxième temps, on cherchera le plan d'échantillonnage optimal lorsque la taille est fixée et petite. Pour cela, on considérera les différents algorithmes qui permettent d'engendrer l'échantillonnage optimal en minimisant l'erreur quadratique moyenne par rapport aux points d'échantillonnage.

Chapitre 1

Estimation de la fonction de concentration et de l'AUC

1.1 Définition du modèle et plans d'échantillonnage

Pour une fonction de concentration g définie dans un intervalle d'observation $[t_{n,0}, t_{n,n}]$, on considère le modèle :

$$X(t_{n,k}) = g(t_{n,k}) + \varepsilon(t_{n,k}) \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

où $\{t_{n,0}, t_{n,1}, \dots, t_{n,n}\}$ sont les instants d'observation de X dans l'intervalle $[t_{n,0}, t_{n,n}]$ et les erreurs $\varepsilon(t_{n,k})$ forment un processus aléatoire autocorrélé avec une moyenne nulle $\mathbb{E}(\varepsilon(t)) = 0$ et une fonction d'autocovariance connue $\mathbb{E}(\varepsilon(t)\varepsilon(s)) = R(t, s)$. On fixe les points $t_{n,0} = 0$ et $t_{n,n} = 1$, et on s'intéresse au choix optimal des points intermédiaires $\{t_{n,1}, \dots, t_{n,n-1}\}$ pour l'estimation de l'intégrale (AUC) suivante :

$$\text{AUC}(g) = \int_0^1 g(t) dt.$$

On note l'estimateur linéaire de $\text{AUC}(g)$ par $L_n(g)$. Le but est de sélectionner les temps d'observations $\{t_{n,1}^*, \dots, t_{n,n-1}^*\}$ qui minimisent l'erreur quadratique moyenne

$$\text{EQM}(L_n(g)) = \mathbb{E}(L_n(g) - \text{AUC}(g))^2.$$

Plans d'échantillonnage réguliers et médians :

On suppose que $h(t)$ est une densité positive sur $[0, 1]$ avec une fonction de répartition strictement positive

$$H(t) = \int_0^t h(s) ds, \quad 0 \leq t \leq 1.$$

Le plan d'échantillonnage régulier défini par :

$$T_n = \left\{ t_{n,k} = H^{-1} \left(\frac{k}{n} \right), k = 0, \dots, n \right\}, \quad (1.1)$$

comprend les bornes de l'intervalle $[0, 1]$, $t_{n,0} = 0$ et $t_{n,n} = 1$. Pour une densité uniforme sur $[0, 1]$, $h(t) \equiv 1$, le plan d'échantillonnage régulier est périodique.

Le plan d'échantillonnage médian défini par :

$$M_n = \left\{ m_{n,k} = H^{-1} \left(\frac{2k+1}{2n} \right), k = 0, \dots, n \right\}.$$

Pour une densité uniforme sur $[0, 1]$, $h(t) \equiv 1$, le plan d'échantillonnage médian est aussi périodique.

Les plans d'échantillonnage réguliers et médians ont été utilisés par exemple par Schoenfelder (1978), Benhenni et Cambanis (1992) et Benhenni (1998) pour l'estimation d'intégrales de processus stochastiques, par Cambanis (1985) pour les problèmes de détection du signal et de la régression simple, et par Sacks et Ylvisaker (1966, 1968) et Su et Cambanis (1993) pour l'estimation des coefficients de régression.

1.2 Modèle paramétrique et hypothèses

Le problème d'intérêt est d'estimer les coefficients de régression d'un modèle paramétrique pour la fonction de concentration à partir d'observations en un nombre fini de points d'échantillonnage de manière appropriée lorsque le processus d'erreur prend des valeurs corrélées. La performance d'un estimateur est mesurée par son erreur quadratique moyenne (EQM). Les points d'échantillonnage qui minimisent l'EQM forment un plan d'échantillonnage optimal, qui est généralement difficile à engendrer. Pour contourner cette difficulté, Sacks et Ylvisaker (1966) ont proposé une approche asymptotique et ont montré que les plans d'échantillonnage réguliers, qui sont déterminés par un bon choix de la densité d'échantillonnage, sont asymptotiquement optimaux lorsque le meilleur estimateur linéaire sans biais (BLUE) est utilisé et le processus d'erreur n'est pas régulier. Schoenfelder (1978) a considéré le plan d'échantillonnage médian avec un estimateur simple, mais sa procédure n'est pas asymptotiquement optimale pour ce problème (voir aussi Cambanis (1985)).

On considère le modèle de régression linéaire simple pour la courbe de concentration :

$$X(t) = \beta f(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1], \quad (1.2)$$

où $g(t) = \beta f(t)$ et le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est centré et sa fonction d'autocovariance $\mathbb{E}(\varepsilon(t)\varepsilon(s)) = R(t, s)$, β est un paramètre inconnu et $f(t)$ est une fonction de régression connue.

Hypothèses :

- (H1) Le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est supposé n'avoir aucune dérivée en moyenne quadratique mais que sa fonction d'autocovariance $R(t, s)$ est supposée avoir des dérivées partielles mixtes continues jusqu'à l'ordre deux en dehors de la diagonale ($t \neq s$) du carré unité.
- (H2) Sur la diagonale ($t = s$), on suppose que les limites à gauche et à droite

$$R^{0,1}(t, t-) = \lim_{s \downarrow t} \partial R(t, s) / \partial s, \quad R^{0,1}(t, t+) = \lim_{s \uparrow t} \partial R(t, s) / \partial s,$$

existent et sont continues. La fonction de saut de $R^{0,1}$ le long de la diagonale, définie par

$$\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+), \quad (1.3)$$

est supposée être positive et non identiquement égale à 0.

- (H3) La fonction de régression $f(t)$ peut s'écrire sous la forme :

$$f(t) = \int_0^1 R(t, s) \varphi(s) ds \quad t \in [0, 1], \quad (1.4)$$

où φ est une fonction continue connue sur $[0, 1]$.

- (H4) $u = \varphi/h$ et h sont deux fois continûment différentiables.
- (H5) La fonction de régression $f(t)$ peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$f(t) = \int_0^1 R(t, s) \varphi(s) ds + \sum_{l=1}^L b_l R(t, a_l),$$

où φ est une fonction continue connue sur $[0, 1]$, les constantes $b_l, l = 1, \dots, L$ sont connues et non nulles et les $a_l, l = 1, \dots, L$ sont des points connus dans $[0, 1]$.

En particulier, pour un processus stationnaire, sa fonction d'autocovariance $R(t, s) = R(t - s)$ est supposée avoir des dérivées d'ordre 1 à gauche et à droite de zéro, la fonction de saut $\alpha(t) = R^{(1)}(0-) - R^{(1)}(0+) = 2R^{(1)}(0-)$ est constante strictement positive.

Exemple 1.2.1 Les processus suivants vérifient ces hypothèses :

1. Le processus d'erreur de Wiener et sa fonction d'autocovariance $R(t, s) = \sigma^2 \min(t, s)$. La fonction de saut $\alpha(t) = \sigma^2 > 0$.

2. Le processus d'erreur d'Ornstein - Uhlenbeck et sa fonction d'autocovariance stationnaire

$$R(t, s) = \sigma^2 e^{-\lambda|t-s|} \text{ pour } \sigma > 0 \text{ et } \lambda > 0.$$

La fonction de saut $\alpha(t) = 2\lambda\sigma^2 > 0$.

3. Une classe générale de fonctions d'autocovariance avec des fonctions de saut non constantes peuvent être trouvées en considérant la classe des processus de la forme :

$$\varepsilon(t) = \theta(t)W(\gamma(t)), \quad t \in [0, 1]$$

où $W(t)$ est un processus de Wiener, $\theta(t)$ est une fonction continûment différentiable sur $[0, 1]$, et $\gamma(t)$ est une fonction continûment différentiable et strictement croissante sur $[0, 1]$. Alors, la fonction d'autocovariance du processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est de la forme :

$$R(t, s) = \theta(t) \min(\gamma(t), \gamma(s))\theta(s)$$

et la fonction de saut correspondante est $\alpha(t) = \theta^2(t)\gamma'(t)$. En particulier, quand $\theta(t) = \gamma(t) = t$, alors $R(t, s) = ts \min(t, s)$ et $\alpha(t) = \theta^2(t)$. Quand $\theta(t) = 1$ et $\gamma(t) = t$, alors le processus d'erreur a une autocovariance de Wiener et lorsque $\theta(t) = e^{-t}$ et $\gamma(t) = e^{2t}$ alors on a une fonction autocovariance de Gauss-Markov.

4. Considérons une transformation de l'échelle de temps qui peut produire une autocovariance non stationnaire de la forme

$$R(t, s) = \sigma^2 \rho^{|t^\lambda - s^\lambda|/\lambda} \text{ pour } (t, s) \in [0, 1]^2, \sigma > 0, 0 < \rho < 1, \text{ et } \lambda > 0.$$

(voir, Núñez-Antón Woodworth (1994) et Ferreira et al. (1997)). En particulier, quand $\lambda = 1$, on obtient un processus d'erreur d'Ornstein - Uhlenbeck avec une fonction d'autocovariance stationnaire avec $\alpha(t) = -2\sigma^2 \ln(\rho)$. Quand $\lambda \neq 1$, alors l'autocovariance est non stationnaire avec une fonction de saut $\alpha(t) = -2\sigma^2 \ln(\rho)t^{\lambda-1}$.

Remarque 1.2.1 *Le problème de l'estimation de la fonction $\alpha(t)$ est abordée dans Istas (1996), Müller-Gronbach et Ritter (1997) et Perrin(1999), en utilisant la méthode des variations quadratiques.*

1.3 Estimation optimale des coefficients de régression et plans d'échantillonnage optimaux

On considère d'abord le modèle linéaire simple ($q = 1$)

$$X(t) = \beta f(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1] \quad (1.5)$$

où $f(t)$ est de la forme simple (1.4) (voir hypothèse (H3)).

Si $X(t)$ peut être observé sur tout l'intervalle $[0, 1]$, alors le meilleur estimateur linéaire sans biais (BLUE) de β est de la forme

$$\hat{\beta} = s^{-2} \int_0^1 X(t)\varphi(t) dt, \quad (1.6)$$

où

$$\begin{aligned} s^2 &= \int_0^1 \varphi(t)f(t) dt \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \varphi(t)R(t, s)\varphi(s) dt ds \end{aligned} \quad (1.7)$$

(voir Parzen (1961), Sacks et Ylvisaker(1966)).

L'erreur quadratique moyenne (EQM) de $\hat{\beta}$ est donnée par

$$\begin{aligned} \text{EQM}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E}(\hat{\beta} - \beta)^2 \\ &= \text{Var}(\hat{\beta}) + \text{Biais}^2(\hat{\beta}) \\ &= \text{Var}(\hat{\beta}) \\ &= s^{-2}. \end{aligned}$$

Alors, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par $L(g) = z_1\hat{\beta}$ où $\text{Var}(L(g)) = z_1^2 s^{-2}$ avec $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$.

Si $X(t)$ est observé à $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ dans l'intervalle $[0, 1]$, alors l'estimateur linéaire de β est défini par

$$\beta_{\mathbf{T}_n} = \sum_{k=0}^n C_{n,k} X(t_{n,k}) = \mathbf{C}'_{\mathbf{T}_n} \mathbf{X}_{\mathbf{T}_n},$$

où $\mathbf{C}'_{\mathbf{T}_n} = (C_{n,0}, \dots, C_{n,n})$ sont les coefficients et $\mathbf{X}_{\mathbf{T}_n} = (X(t_{n,0}), \dots, X(t_{n,n}))$ est le vecteur d'observations aux points du plan \mathbf{T}_n . Alors l'erreur quadratique moyenne de $\beta_{\mathbf{T}_n}$ est

$$\begin{aligned} \text{EQM}(\beta_{\mathbf{T}_n}) &= \mathbb{E}(\beta_{\mathbf{T}_n} - \beta)^2 \\ &= \text{Var}(\beta_{\mathbf{T}_n}) + \text{Biais}^2(\beta_{\mathbf{T}_n}), \end{aligned}$$

où $\text{Biais}(\beta_{\mathbf{T}_n}) = \beta(\mathbf{C}'_{\mathbf{T}_n} \mathbf{f}_{\mathbf{T}_n} - 1)$ et $\text{Var}(\beta_{\mathbf{T}_n}) = \mathbf{C}'_{\mathbf{T}_n} \mathbf{R}_{\mathbf{T}_n} \mathbf{C}_{\mathbf{T}_n}$, avec

$\mathbf{f}'_{\mathbf{T}_n} = (f(t_{n,0}), \dots, f(t_{n,n}))$ et $\mathbf{R}_{\mathbf{T}_n} = (R(t_{n,k}, t_{n,j}))_{(n+1) \times (n+1)}$ est supposée être inversible pour tout n .

On souhaite choisir les coefficients $\mathbf{C}_{\mathbf{T}_n}$ et les plans d'échantillonnage \mathbf{T}_n de manière que le $\text{Biais}(\beta_{\mathbf{T}_n})$ et la $\text{Var}(\beta_{\mathbf{T}_n})$ soient respectivement aussi proches

que possible de 0 et de $\text{Var}(\hat{\beta}) = s^{-2}$.

Pour un plan d'échantillonnage fixé T_n , les coefficients optimaux \hat{C}'_{T_n} sont ceux du BLUE $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$ qui minimise la variance $\text{Var}(\beta_{T_n})$ sous la condition $\text{Biais}(\beta_{T_n}) = 0$, c'est à dire

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_n^{\text{blue}} &= \hat{C}'_{T_n} X_{T_n}, \text{ où} \\ \hat{C}'_{T_n} &= \mathbf{f}'_{T_n} \mathbf{R}_{T_n}^{-1} / \mathbf{f}'_{T_n} \mathbf{R}_{T_n}^{-1} \mathbf{f}_{T_n},\end{aligned}\quad (1.8)$$

et la variance correspondante est

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) = (\mathbf{f}'_{T_n} \mathbf{R}_{T_n}^{-1} \mathbf{f}_{T_n})^{-1}.$$

Alors, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par $L_n^{\text{blue}}(g) = z_1 \hat{\beta}_n^{\text{blue}}$.

Un plan d'échantillonnage optimal $T_n^0 = \{t_{n,k}^0\}_0^n$ de taille $n + 1$ fixée, qui minimise $\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}})$, est généralement difficile à trouver. Afin de contourner cette difficulté, Sacks et Ylvisaker (1966) ont introduit des suites de plans d'échantillonnage $\{T_n^*\}_1^\infty$ qui sont asymptotiquement optimaux quand n tend vers l'infini au sens suivant :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \text{Var}(\hat{\beta}_{T_n^*}^{\text{blue}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right\} / \left\{ \inf_{T_n} \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right\} = 1, \quad (1.9)$$

où l'infimum est pris sur tous les plans d'échantillonnage de taille $n + 1$.

Sacks et Ylvisaker (1966) ont montré le résultat suivant pour l'estimateur BLUE.

Théorème 1.3.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$, donné par (1.8), satisfait*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\inf_{T_n} \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) - s^{-2} \right) = \frac{s^{-4}}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3.$$

où l'infimum est pris parmi tous les plans d'échantillonnage de taille $n + 1$. Par ailleurs, le plan d'échantillonnage T_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} / \int_0^1 \{ \alpha(u) \varphi^2(u) \}^{1/3} du, \quad (1.10)$$

est asymptotiquement optimal.

Sacks et Ylvisaker (1966) ont montré que le plan d'échantillonnage régulier déterminé par h^* en (1.10) est asymptotiquement optimal quand le BLUE $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$ en (1.8) est utilisé. On en déduit le résultat suivant pour l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$.

Corollaire 1.3.1 L'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}) - s^{-2} \right) = \frac{s^{-4}}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3. \quad (1.11)$$

On en déduit le même type de résultat pour l'estimateur $L_n^{blue}(g)$ de l'AUC.

Corollaire 1.3.2 Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $L_n^{blue}(g)$, satisfait

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\inf_{\mathbf{T}_n} \text{Var}(L_n^{blue}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{\gamma}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3, \quad (1.12)$$

avec

$$\gamma = \frac{(\int_0^1 f(t) dt)^2}{(\int_0^1 f(t) \varphi(t) dt)^2},$$

où l'infimum est pris parmi tous les plans d'échantillonnage de taille $n + 1$. Par ailleurs, le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), est asymptotiquement optimal.

Corollaire 1.3.3 L'estimateur $L_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{\gamma}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3. \quad (1.13)$$

1.4 Estimateur simple sans biais et plans d'échantillonnage optimaux

L'estimateur optimal BLUE du coefficient du modèle linéaire simple dépend de l'inverse de la matrice d'autocovariance, supposée connue, et par conséquent manque de stabilité et de robustesse. On construit alors des estimateurs simples et stables qui ne dépendent pas de cette matrice et qui utilisent seulement les observations aux points du plan d'échantillonnage. L'objectif est de vérifier que cet estimateur est aussi efficace que l'estimateur BLUE, qui est de savoir s'il partage les mêmes propriétés statistiques et la même performance asymptotique au sens de son erreur quadratique moyenne.

Schoenfelder (1978) et Cambanis et Masry (1983), ont utilisé des coefficients simples de la forme

$$C_{n,k} = n^{-1} s^{-2} (\varphi/h)(t_{n,k}), \quad k = 1, \dots, n,$$

avec des plans d'échantillonnage réguliers et médians. Les estimateurs obtenus $\beta_n(r, h)$ et $\beta_n(m, h)$ qui sont construits respectivement à partir de ces plans d'échantillonnage réguliers et médians sont généralement biaisés. Le plan d'échantillonnage régulier ou médian, en utilisant des estimateurs simples $\beta_n(r, h^*)$ ou $\beta_n(m, h^*)$ est asymptotiquement optimal pour les problèmes de l'estimation d'intégrales de processus stochastiques (Benhenni et Cambanis (1992)) et de détection du signal et de la régression simple (Cambanis (1985)), où

$$h^*(t) = \{\alpha(t)\varphi^2(t)\}^{1/3} / \int_0^1 \{\alpha(u)\varphi^2(u)\}^{1/3} du.$$

Cependant, pour le problème de régression, son comportement asymptotique est donné par le Théorème suivant.

Théorème 1.4.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $\beta_n(m, h)$ satisfait*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(EQM(\beta_n(m, h)) - s^{-2} \right) = \frac{s^{-4}}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt + \frac{s^{-4}}{12} \kappa,$$

où

$$\kappa = \int_0^1 \left[\frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} - \frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} \right] h(t) dt,$$

et

$$K(t, s) = \left(\frac{\varphi}{h} \right)(t) R(t, s) \left(\frac{\varphi}{h} \right)(s).$$

Ainsi, le plan d'échantillonnage médian n'est pas généralement asymptotiquement optimal car l'estimateur $\beta_n(m, h)$ ne possède pas la même performance asymptotique que l'estimateur BLUE.

Su et Cambanis (1993) ont défini des estimateurs simples construits à partir d'un plan d'échantillonnage médian modifié et sophistiqué $\beta_n(mm, h)$. Les estimateurs simples obtenus sont encore biaisés mais asymptotiquement optimaux.

$$\beta_n(mm, h) = s^{-2} \sum_{k=1}^n W_{n,k} \left(\frac{\varphi}{h} X \right) (t_{n,k,m}),$$

où les poids $\{W_{n,k}\}_1^n$ sont donnés par

$$\begin{aligned} W_{n,1} &= W_{n,n} = \frac{1}{2\sqrt{3}(n-1)}, \\ W_{n,k} &= \frac{1}{n-1} \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{3}(n-1)} \right\}, \quad k = 2, \dots, n-1, \end{aligned}$$

où

$$t_{n,k,m} = H^{-1} \left(\frac{1}{2\sqrt{3}(n-1)} + \frac{k-3/2}{n-1} \rho_n \right), \quad k = 2, \dots, n-1,$$

avec $\rho_n = (n - 1 - 1/\sqrt{3})/(n - 2)$.

On considère le modèle de régression simple (1.5) et $f(t)$ donnée par (1.4). L'estimateur BLUE $\hat{\beta}$ de β sur $[0, 1]$ défini en (1.6) peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\hat{\beta} = \frac{I(X)}{I(f)},$$

où

$$I(X) = \int_0^1 X(t)\varphi(t) dt, \quad (1.14)$$

$$I(f) = \int_0^1 f(t)\varphi(t) dt. \quad (1.15)$$

Alors, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par $L(g) = z_1\hat{\beta}$ où $\text{Var}(L(g)) = z_1^2 s^{-2}$ avec $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$.

On vérifie que $\mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta$ et $\text{Var}(\hat{\beta}) = s^{-2} = 1/I(f)$.

Si $X(t)$ est observé en $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ engendré par une densité positive $h(t)$, définie selon (1.1), alors en s'inspirant de la méthode des trapèzes, on construit l'estimateur linéaire simple de β par :

$$\hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \frac{L_n(X)}{L_n(f)}, \quad (1.16)$$

où

$$L_n(X) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} X \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} X \right)(t_{n,k+1}) \right), \quad (1.17)$$

$$L_n(f) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k+1}) \right). \quad (1.18)$$

Cet estimateur dépend seulement des observations aux points du plan d'échantillonnage régulier et par conséquent facile à calculer. Par ailleurs, il est stable car il ne dépend pas de l'inverse de la matrice d'autocovariance. On estime ensuite l'AUC(g) par $L_n^{\text{trap}}(g) = z_1\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$.

Dans la Proposition suivante, on donne les propriétés statistiques de l'estimateur linéaire simple $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ concernant l'absence de biais et la variance asymptotique.

Proposition 1.4.1 *L'estimateur linéaire simple $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ défini par (1.16), vérifie les propriétés suivantes :*

(i) $\text{Biais}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) = 0$ pour tout n

(ii) $\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \longrightarrow \text{Var}(\hat{\beta}) = s^{-2}$ quand $n \rightarrow \infty$

où s^2 est défini en (1.7).

La variation résiduelle entre l'estimateur empirique $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ et l'estimateur continu $\hat{\beta}$ peut se décomposer de la façon suivante :

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) = \left(\frac{\text{Var}(L_n(X)) - s^2}{L_n^2(f)} \right) + \frac{(I(f) - L_n(f))(I(f) + L_n(f))}{L_n^2(f)I(f)}. \quad (1.19)$$

C'est à dire une composante qui vient de l'aléa et une composante déterministe. Il est facile de vérifier que $\text{Var}(L_n(X))$ est donnée par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_n(X)) = & \frac{1}{4n^2} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ K(t_{n,i}, t_{n,j}) + K(t_{n,i}, t_{n,j+1}) \right. \\ & \left. + K(t_{n,i+1}, t_{n,j}) + K(t_{n,i+1}, t_{n,j+1}) \right\}, \end{aligned} \quad (1.20)$$

où la fonction d'autocovariance pondérée (symétrique) est définie par

$$K(t, s) = \left(\frac{\varphi}{h}\right)(t)R(t, s)\left(\frac{\varphi}{h}\right)(s). \quad (1.21)$$

La vitesse de convergence optimale de la variance de l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ ainsi que le plan d'échantillonnage optimal sont obtenus à travers le Théorème 1.4.2 ci-dessous. Pour cela, les trois lemmes suivants sont nécessaires car ils donnent le comportement asymptotique des deux composantes en (1.19).

Lemme 1.4.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $L_n(X)$, défini en (1.17) avec un plan d'échantillonnage régulier engendré par une densité h , satisfait*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_n(X)) - s^2 \right) = & \frac{1}{12} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+)) dt \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \left(\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) dt. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Lemme 1.4.2 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $L_n(f)$, défini en (1.18) avec un plan d'échantillonnage régulier engendré par une densité h , satisfait*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(I(f) - L_n(f) \right) = -\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) dt. \quad (1.23)$$

Lemme 1.4.3 *Sous les hypothèses (H1) et (H2), on a*

$$K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+) = \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)}. \quad (1.24)$$

Théorème 1.4.2 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $\hat{\beta}_n$ défini par (1.16), vérifie*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{trap}) - s^{-2} \right) = \frac{s^{-4}}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt, \quad (1.25)$$

et le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^ engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), est asymptotiquement optimal.*

Corollaire 1.4.1 *L'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}) - s^{-2} \right) = \frac{s^{-4}}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3.$$

D'après le résultat de ce Corollaire, l'estimateur simple $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}$, avec un plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* optimal, possède exactement la même performance asymptotique que l'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$ (voir Corollaire 1.3.1).

Corollaire 1.4.2 *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 1.4.2, on obtient*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_n^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{\gamma}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt, \quad (1.26)$$

où

$$\gamma = \frac{(\int_0^1 f(t) dt)^2}{(\int_0^1 f(t) \varphi(t) dt)^2},$$

et le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^ engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), est asymptotiquement optimal.*

Corollaire 1.4.3 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) et (H4), l'estimateur $L_n^{trap}(g)$, satisfait*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\inf_{\mathbf{T}_n} \text{Var}(L_n^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{\gamma}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3.$$

où l'infimum est pris parmi tous les plans d'échantillonnage de taille $n + 1$. Par ailleurs, le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^ engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), est asymptotiquement optimal.*

Corollaire 1.4.4 *L'estimateur $L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{\gamma}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3.$$

Ce Corollaire avec le Corollaire 1.3.3 nous confirment que les deux estimateurs sans biais $L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)$, $L_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}(g)$, avec un plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* optimal, ont exactement la même performance asymptotique.

1.5 Forme générale de la fonction de régression

On considère le modèle linéaire simple (1.5) et la fonction de régression $f(t)$ de la forme générale donnée par l'hypothèse (H5).

Le meilleur estimateur linéaire continue sans biais (BLUE) de β sur $[0, 1]$ est défini par :

$$\hat{\beta}_a = s_L^{-2} \left\{ \int_0^1 X(s)\varphi(s) ds + \sum_{l=1}^L b_l X(a_l) \right\}, \quad (1.27)$$

et la variance correspondante est

$$\text{Var}(\hat{\beta}_a) = s_L^{-2},$$

où

$$s_L^2 \triangleq s^2 + 2 \sum_{l=1}^L b_l \int_0^1 \varphi(s)R(s, a_l) ds + \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^L b_l R(a_l, a_j) b_j. \quad (1.28)$$

L'estimateur BLUE $\hat{\beta}_a$ de β sur $[0, 1]$ peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\hat{\beta}_a = \frac{I_a(X)}{I_a(f)},$$

avec

$$\begin{aligned} I_a(X) &= I(X) + \sum_{l=1}^L b_l X(a_l), \\ I_a(f) &= I(f) + \sum_{j=1}^L b_j f(a_j) = s_L^2, \end{aligned}$$

où $I(X), I(f)$ sont définis respectivement en (1.14) et (1.15). On vérifie que $\mathbb{E}(\hat{\beta}_a) = \beta$ et $\text{Var}(\hat{\beta}_a) = s_L^{-2} = 1/I_a(f)$.

Alors, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par $L_a(g) = z_1 \hat{\beta}_a$ où $\text{Var}(L_a(g)) = z_1^2 s_L^{-2}$ avec $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$.

Si $X(t)$ est observé en $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ engendré par une densité positive $h(t)$, défini selon (1.1), alors on construit l'estimateur linéaire ajusté simple de β par :

$$\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}} = \frac{L_{a,n}(X)}{L_{a,n}(f)}, \quad (1.29)$$

où

$$\begin{aligned} L_{a,n}(X) &= L_n(X) + \sum_{l=1}^L b_l X(a_l), \\ L_{a,n}(f) &= L_n(f) + \sum_{j=1}^L b_j f(a_j), \end{aligned}$$

et $L_n(X), L_n(f)$ sont définis respectivement en (1.17) et (1.18). On estime ensuite l'AUC(g) par $L_{a,n}^{\text{trap}}(g) = z_1 \hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$.

Dans la Proposition et le Théorème suivants, on donne les propriétés statistiques de l'estimateur linéaire ajusté $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$; l'absence de biais et le comportement asymptotique de sa variance. La démonstration de cette Proposition est similaire à celle de la Proposition 1.4.1.

Proposition 1.5.1 *L'estimateur linéaire ajusté $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$ défini par (1.29), vérifie les propriétés suivantes :*

(i) $\text{Biais}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) = 0$ pour tout n

(ii) $\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) \longrightarrow \text{Var}(\hat{\beta}_a) = s_L^{-2}$ quand $n \rightarrow \infty$

où s_L^2 est défini en (1.28).

La vitesse exacte de convergence de la variation résiduelle ainsi que la densité optimale d'échantillonnage sont établies par le résultat suivant.

Théorème 1.5.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H4) et (H5), l'estimateur ajusté $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$ donné par (1.29), vérifie*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - s_L^{-2} \right) &= \frac{s_L^{-4}}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \quad (1.30) \\ &+ \frac{s_L^{-4}}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - R(0, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right. \\ &\left. + R^{1,0}(1, a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (1) - R^{1,0}(0, a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (0) \right\}, \end{aligned}$$

où $a_l \neq 0$ ou $1 \quad \forall l = 1, \dots, L$ et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est $h^*(t)$ définie par (1.10).

Remarque 1.5.1 *S'il existe des a_l pour lesquels $a_l = 0$ ou 1 , alors la constante asymptotique n'est pas définie (car $R^{0,1}(0, a_l)$ et $R^{0,1}(1, a_l)$ n'existent pas). Pour remédier à ce problème, on peut par exemple ajuster l'estimateur simple en modifiant les coefficients des valeurs de X en ces points.*

Corollaire 1.5.1 *L'estimateur ajusté $\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}) - s_L^{-2} \right) &= \frac{s_L^{-4}}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3 \\ &+ \frac{s_L^{-4}}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1, a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(1) - R(0, a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(0) \right. \\ &\left. + R^{1,0}(1, a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(1) - R^{1,0}(0, a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(0) \right\}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Par conséquent, on obtient la vitesse de convergence exacte de la variance de l'estimateur de l'AUC ainsi que la densité optimale d'échantillonnage à travers les deux Corollaires suivants.

Corollaire 1.5.2 *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 1.5.1, on obtient*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{a, n}^{trap}(g)) - \text{Var}(L_a(g)) \right) &= \frac{s_L^{-4} z_1^2}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \\ &+ \frac{s_L^{-4} z_1^2}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)(1) - R(0, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)(0) \right. \\ &\left. + R^{1,0}(1, a_l) \left(\frac{u}{h} \right)(1) - R^{1,0}(0, a_l) \left(\frac{u}{h} \right)(0) \right\}, \end{aligned} \quad (1.32)$$

et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est $h^*(t)$ définie par (1.10).

Corollaire 1.5.3 *L'estimateur $L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), vérifie*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) - \text{Var}(L_a(g)) \right) &= \frac{s_L^{-4} z_1^2}{12} \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3 \\ &+ \frac{s_L^{-4} z_1^2}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1, a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(1) - R(0, a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(0) \right. \\ &\left. + R^{1,0}(1, a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(1) - R^{1,0}(0, a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(0) \right\}. \end{aligned}$$

1.6 Exemples

Dans cette section, à travers deux exemples, modèle linéaire et quadratique, on vérifie les hypothèses (H1), (H2), (H4), (H5) et on donne la forme asymptotique du plan d'échantillonnage optimal défini en (1.10). De même, on étudie le comportement de la variation résiduelle en fonction de la taille d'échantillonnage n pour les deux estimateurs : $\hat{\beta}_n^{blue}$ et $\hat{\beta}_{a, n}^{trap}$. On compare aussi la performance du plan d'échantillonnage optimal et le plan d'échantillonnage uniforme.

1.6.1 Modèle linéaire

On considère le modèle de régression simple

$$X(t) = \beta t + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1]$$

où $\varepsilon(t)$ est un processus d'erreur de type "Ornstein - Uhlenbeck"(Gauss-Markov) et sa fonction d'autocovariance $R(t, s) = \sigma^2 e^{-\lambda|t-s|}$ pour $\sigma > 0$ et $\lambda > 0$. On montre que $f(t) = t$ peut s'écrire sous l'hypothèse (H5) avec

$$\varphi(s) = \lambda s / (2\sigma^2), L = 2, a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = -1 / (2\lambda\sigma^2), b_2 = (\lambda + 1) / (2\lambda\sigma^2).$$

En effet,

$$\begin{aligned} \int_0^1 R(t, s)\varphi(s) ds &= \int_0^t R(t, s)\varphi(s) ds + \int_t^1 R(t, s)\varphi(s) ds \\ &= \int_0^t \sigma^2 e^{-\lambda(t-s)} \lambda s / (2\sigma^2) ds + \int_t^1 \sigma^2 e^{-\lambda(s-t)} \lambda s / (2\sigma^2) ds \\ &= t + \frac{e^{-\lambda t}}{2\lambda} - \left(\frac{\lambda + 1}{2\lambda}\right) e^{-\lambda(1-t)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{L=2} b_l R(t, a_l) &= b_1 R(t, a_1) + b_2 R(t, a_2) \\ &= \left(\frac{-1}{2\lambda\sigma^2}\right) (\sigma^2 e^{-\lambda t}) + \left(\frac{\lambda + 1}{2\lambda\sigma^2}\right) (\sigma^2 e^{-\lambda(1-t)}) \\ &= \frac{-1}{2\lambda} e^{-\lambda t} + \left(\frac{\lambda + 1}{2\lambda}\right) e^{-\lambda(1-t)}. \end{aligned}$$

Il s'ensuit que l'hypothèse (H5) est vérifiée car

$$\int_0^1 R(t, s)\varphi(s) ds + \sum_{l=1}^{L=2} b_l R(t, a_l) = t = f(t).$$

Les dérivées partielles d'ordre 1 à gauche et à droite de la fonction d'autocovariance le long de la diagonale sont :

$$\begin{aligned} R^{0,1}(t, t-) &= \lim_{s \downarrow t} \frac{\partial R(t, s)}{\partial s} = \lambda\sigma^2 \\ R^{0,1}(t, t+) &= \lim_{s \uparrow t} \frac{\partial R(t, s)}{\partial s} = -\lambda\sigma^2 \end{aligned}$$

et la fonction de saut est :

$$\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+) = 2\lambda\sigma^2 > 0.$$

Il est facile de vérifier que la densité du plan d'échantillonnage (asymptotiquement) optimal $h^*(t)$ définie selon (1.10) est $h^*(t) = (5/3)t^{2/3}$ et les points

optimaux sont $t_{n,k}^* = (k/n)^{3/5}$, $k = 0, \dots, n$.

Les deux figures FIG. 1.1, FIG. 1.2 suivantes représentent la différence entre la variance de chaque estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$, resp. $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$, basé sur des observations discrètes du plan d'échantillonnage régulier optimal et la variance de l'estimateur BLUE basé sur des observations continues respectivement pour $\lambda = 1, \sigma^2 = 1$ et $\lambda = 10, \sigma^2 = 1$.

Pour $n > 10$, on voit que l'estimateur des Trapèzes a exactement la même performance que l'estimateur optimal BLUE discret. Même pour une petite taille de l'échantillon $n \leq 10$, il n'y a pas de différence significative entre ces deux estimateurs. Par ailleurs, on remarque que pour une petite taille de l'échantillon n , les performances des deux estimateurs sont beaucoup plus proches pour des erreurs moins corrélées $\lambda = 10$, que pour des erreurs plus corrélées $\lambda = 1$.

Dans le tableau TAB. 1.1 ci-dessus, on compare l'estimateur des Trapèzes

	n	3	5	10	12	15	20	30
$\lambda = 0.5$	uniforme	0.00008	0.00003	0.00001	0.00001	0.00000	0.00000	0.00000
	optimal	0.00012	0.00004	0.00001	0.00001	0.00000	0.00000	0.00000
$\lambda = 1$	uniforme	0.00111	0.00041	0.00010	0.00007	0.00005	0.00003	0.00001
	optimal	0.00121	0.00041	0.00010	0.00006	0.00004	0.00002	0.00000
$\lambda = 5$	uniforme	0.0813	0.0321	0.0083	0.0058	0.0037	0.0021	0.0009
	optimal	0.0581	0.0222	0.0057	0.0040	0.0025	0.0014	0.0006
$\lambda = 10$	uniforme	0.2264	0.0995	0.0273	0.0192	0.0124	0.0070	0.0031
	optimal	0.1626	0.0667	0.0180	0.0126	0.0081	0.0046	0.0021

TAB. 1.1 – Trapèze ($\text{Var} - s_L^{-2}$), $\lambda = 0.5, 1, 5, 10$, $\sigma^2 = 1$ pour différentes valeurs de la taille n de l'échantillon

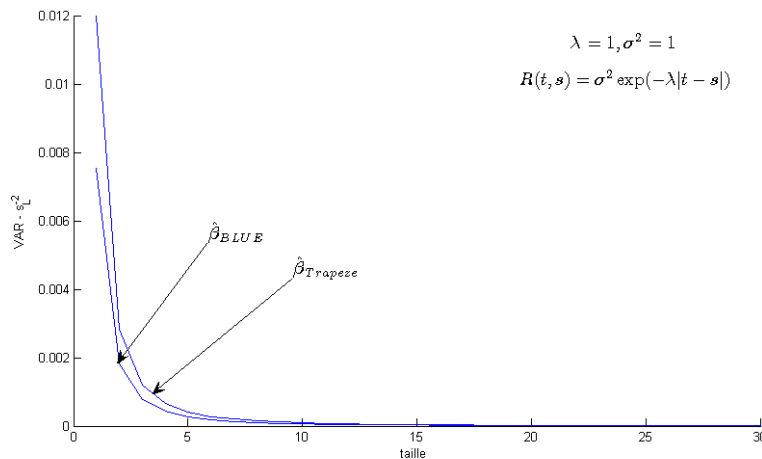


FIG. 1.1 – ($\text{VAR} - s_L^{-2}$) contre la taille de l'échantillon

construit à partir du plan d'échantillonnage optimal $\hat{\beta}_{a, T_n^*}^{\text{trap}}$ et celui qui est

CHAPITRE 1 : Estimation de la fonction de concentration et de l'AUC

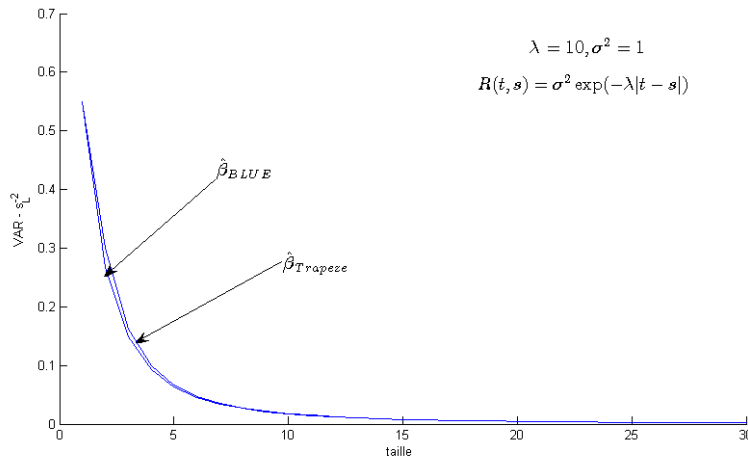


FIG. 1.2 – $(\text{VAR} - s_L^{-2})$ contre la taille de l'échantillon

construit à partir d'un plan d'échantillonnage uniforme $\hat{\beta}_{a,Unif}^{\text{trap}}$ à travers la variation résiduelle relative :

$$\frac{\left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a,Unif}^{\text{trap}}) - s_L^{-2}\right) - \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a,T_n^*}^{\text{trap}}) - s_L^{-2}\right)}{\text{Var}(\hat{\beta}_{a,Unif}^{\text{trap}}) - s_L^{-2}}$$

Lorsque λ est petit (corrélation forte), $\lambda = 0.5$ et 1 ; il n'y a pas de différence significative entre les performances des deux plans d'échantillonnage (optimal et uniforme). Par contre, lorsque λ est grand (corrélation faible), $\lambda = 5$ et 10 ; l'utilisation d'un plan d'échantillonnage optimal réduit la variation résiduelle de 31% ($\lambda = 5$) à 34% ($\lambda = 10$) par rapport à un plan d'échantillonnage uniforme.

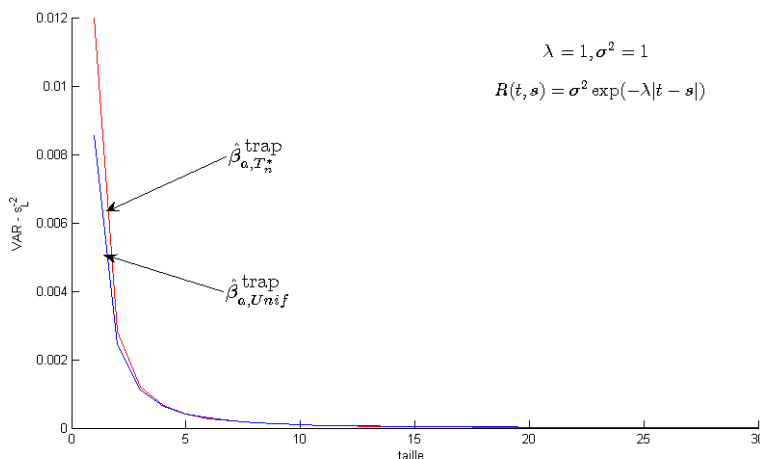


FIG. 1.3 – $(\text{VAR} - s_L^{-2})$ contre la taille de l'échantillon

De la figure FIG. 1.3 pour $\lambda = 1$, on constate que pour une petite taille de l'échantillon $n \leq 10$, l'estimateur $\hat{\beta}_{a,Unif}^{\text{trap}}$ est légèrement mieux que l'estima-

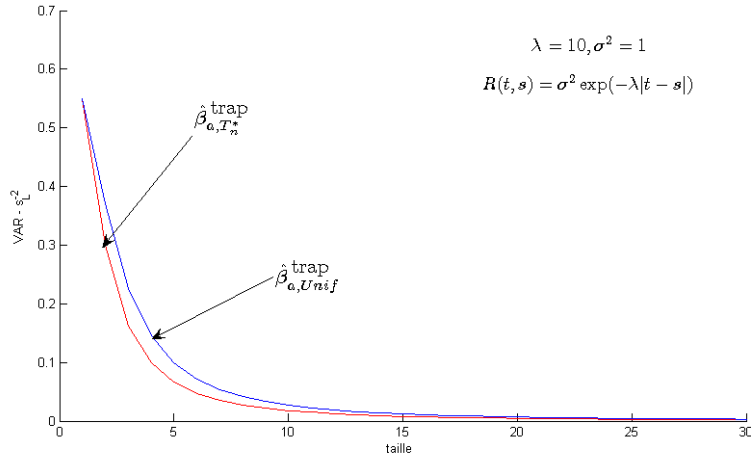


FIG. 1.4 – $(\text{VAR} - s_L^{-2})$ contre la taille de l'échantillon

teur $\hat{\beta}_{a, T_n^*}^{\text{trap}}$. Mais pour $n > 10$, la performance de ces deux estimateurs est la même.

Pour $\lambda = 10$, la FIG. 1.4 nous informe que si la taille de l'échantillon $n \leq 15$, l'estimateur avec le plan d'échantillonnage optimal $T_n^* = T_n(h^*)$, $\hat{\beta}_{a, T_n^*}^{\text{trap}}$ est meilleur que l'estimateur muni du plan d'échantillonnage uniforme $\hat{\beta}_{a, Unif}^{\text{trap}}$. Néanmoins pour $n > 15$, les deux plans d'échantillonnage ont presque la même performance.

1.6.2 Modèle quadratique

On considère le modèle de régression quadratique

$$X(t) = \beta t^2 + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1]$$

où $\varepsilon(t)$ est un processus d'erreur de type "Mouvement Brownien" (Wiener) et sa fonction d'autocovariance $R(t, s) = \sigma^2 \min(t, s)$ pour $\sigma > 0$. On montre que $f(t) = t^2$ peut s'écrire sous l'hypothèse (H5) avec

$$\varphi(s) = -2/\sigma^2, L = 1, a_1 = 1, b_1 = 2/\sigma^2.$$

En effet,

$$\begin{aligned} \int_0^1 R(t, s)\varphi(s) ds &= \int_0^t R(t, s)\varphi(s) ds + \int_t^1 R(t, s)\varphi(s) ds \\ &= \int_0^t -2s ds + \int_t^1 -2t ds \\ &= t^2 - 2t. \end{aligned}$$

et

$$\sum_{l=1}^{L=1} b_l R(t, a_l) = b_1 R(t, a_1) = 2t.$$

Il s'ensuit que l'hypothèse (H5) est vérifiée car

$$\int_0^1 R(t, s)\varphi(s) ds + \sum_{l=1}^{L=1} b_l R(t, a_l) = t^2 = f(t).$$

Les dérivées partielles d'ordre 1 à gauche et à droite de la fonction d'autocovariance le long de la diagonale sont :

$$R^{0,1}(t, t-) = \lim_{s \downarrow t} \frac{\partial R(t, s)}{\partial s} = \sigma^2$$

$$R^{0,1}(t, t+) = \lim_{s \uparrow t} \frac{\partial R(t, s)}{\partial s} = 0$$

et la fonction de saut est :

$$\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+) = \sigma^2 > 0.$$

Il est facile de vérifier que la densité du plan d'échantillonnage (asymptotiquement) optimal $h^*(t)$ définie selon (1.10) est $h^*(t) = 1$ et les points optimaux sont $t_{n,k}^* = k/n, k = 1, \dots, n$ et donc ce plan optimal correspond à un plan d'échantillonnage périodique.

La figure FIG. 1.5 représente la différence entre la variance de chaque estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$, resp. $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trapeze}}$ basé sur des observations discrètes du plan d'échantillonnage optimal et la variance de l'estimateur BLUE basé sur des observations continues pour $\sigma^2 = 1$.

De même, pour $n > 10$, on voit que l'estimateur des Trapèzes a exactement la même performance asymptotique que l'estimateur optimal BLUE discret. Même pour une petite taille de l'échantillon, $n \leq 10$, il n'y a pas de différence significative entre ces deux estimateurs.

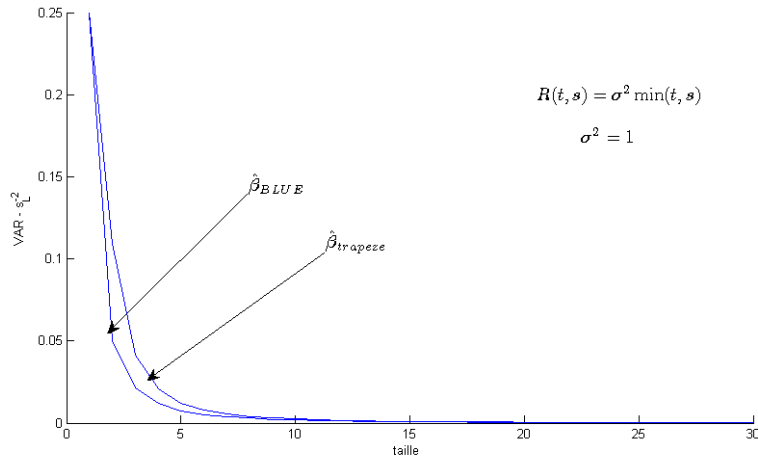


FIG. 1.5 – VAR – s_L^{-2} contre la taille de l'échantillon

Remarque 1.6.1 Pour une fonction de régression f donnée, il est en général difficile de trouver analytiquement la fonction φ qui vérifie l'hypothèse (H3) ou (H5). Par contre, il existe des algorithmes numériques qui permettent d'approximer efficacement cette fonction. On donne, entre autres, la référence du livre de Kendall E. Atkinson (1976).

1.7 Plans d'échantillonnage optimaux selon le critère du Minimax

Le Plan d'échantillonnage asymptotiquement optimal T_n^* engendré par la densité optimale

$$h^*(t) = \{\alpha(t)\varphi^2(t)\}^{1/3} / \int_0^1 \{\alpha(u)\varphi^2(u)\}^{1/3} du,$$

peut ne pas être robuste par rapport à une mauvaise spécification de la fonction d'autocovariance R et de la fonction φ . Pour cette raison, on propose le critère du minimax pour la détermination du plan d'échantillonnage optimal et d'appeler une densité d'échantillonnage h^* est optimale selon le critère du Minimax pour l'estimation de β ou de l'AUC(g) si elle minimise

$$\max \{\Psi_{\alpha,\varphi}(h) \mid (\alpha, \varphi) \in \Lambda\}, \quad (1.33)$$

où

$$\Psi_{\alpha,\varphi}(h) = \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt, \quad (1.34)$$

et Λ est une classe appropriée des fonctions définie par :

$$\Lambda = \left\{ (\alpha, \varphi) \in C[0, 1] \times C[0, 1] \text{ tel que } \int_0^1 \alpha(t) dt \leq \epsilon_1, \int_0^1 \varphi(t) dt \leq \sqrt{\epsilon_2} \right\}. \quad (1.35)$$

Le critère de minimax a été considéré par Biedermann et Dette (2001) pour déterminer un plan d'échantillonnage optimal pour l'estimation de la fonction de régression pour un modèle non paramétrique avec des erreurs i.i.d.

Théorème 1.7.1 Soit Λ défini par (1.35) alors le plan d'échantillonnage régulier T_n^* engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10) est optimal selon le critère du minimax (1.33).

1.8 Preuves des résultats

1.8.1 Preuve de la Proposition 1.4.1

Dans tout ce qui suit, pour faciliter la présentation du rapport on écrit t_k à la place de $t_{n,k}$.

Comme $X(t) = \beta f(t) + \varepsilon(t)$ et que le processus d'erreur est centré alors $\mathbb{E}(X(t)) = \beta f(t)$. Il s'ensuit que $\mathbb{E}(L_n(X)) = \beta L_n(f)$ et que

$$\mathbb{E}(\hat{\beta}_n) = \frac{\mathbb{E}(L_n(X))}{L_n(f)} = \frac{\beta L_n(f)}{L_n(f)} = \beta,$$

d'où $\text{Biais}(\hat{\beta}_n) = \mathbb{E}(\hat{\beta}_n) - \beta = 0$.

On rappelle que la variance du numérateur de $\hat{\beta}_n$ s'écrit :

$$\text{Var}(L_n(X)) = \frac{1}{4n^2} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} (K(t_i, t_j) + K(t_i, t_{j+1}) + K(t_{i+1}, t_j) + K(t_{i+1}, t_{j+1})),$$

où la fonction d'autocovariance pondérée $K(t, s)$ est définie par (1.21).

En utilisant le Théorème de la moyenne pour l'intégrale de la densité h , on a

$$\frac{1}{n} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} h(t) dt = h(\xi_i) \Delta t_i, \quad \frac{1}{n} = \int_{t_j}^{t_{j+1}} h(t) dt = h(\eta_j) \Delta t_j,$$

où $t_i < \xi_i < t_{i+1}$ et $t_j < \eta_j < t_{j+1}$ sont des points intermédiaires et donc on peut écrire

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_n(X)) &= \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} (K(t_i, t_j) + K(t_i, t_{j+1}) + K(t_{i+1}, t_j) + K(t_{i+1}, t_{j+1})) h(\xi_i) h(\eta_j) \\ &\quad \times \Delta t_i \Delta t_j. \end{aligned}$$

En utilisant l'intégrale de Riemann quand $n \rightarrow \infty$, on obtient

$$\text{Var}(L_n(X)) \longrightarrow \int_0^1 \int_0^1 \varphi(t) R(t, s) \varphi(s) dt ds = s^2 = I(f).$$

De la même manière, comme $L_n(f)$ est définie par

$$L_n(f) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k+1}) \right),$$

alors,

$$L_n(f) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k+1}) \right) h(c_k) \Delta t_k,$$

où $t_k < c_k < t_{k+1}$ est un point intermédiaire.

Il s'ensuit que par l'intégration de Riemann quand $n \rightarrow \infty$,

$$L_n(f) \longrightarrow \int_0^1 \varphi(t)f(t) dt = s^2 = I(f),$$

et finalement

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) = \frac{\text{Var}(L_n(X))}{L_n^2(f)} \longrightarrow s^{-2} = \text{Var}(\hat{\beta}).$$

1.8.2 Preuve du Théorème 1.4.2

Preuve du lemme 1.4.1

D'un côté, on a

$$\begin{aligned} s^2 &= \int_0^1 f(t)\varphi(t) dt \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \varphi(t)R(t, s)\varphi(s) dt ds \\ &= \int_0^1 \int_0^1 K(t, s)h(t)h(s) dt ds \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} K(t, s)h(t)h(s) dt ds, \end{aligned}$$

où $K(t, s)$ est définie selon (1.21).

De l'autre côté, comme $\frac{1}{n} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} h(t) dt = \int_{t_j}^{t_{j+1}} h(s) ds$, on peut écrire

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_n(X)) &= \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} (K(t_i, t_j) + K(t_i, t_{j+1}) + K(t_{i+1}, t_j) + K(t_{i+1}, t_{j+1})) \\ &\quad \times h(t)h(s) dt ds. \end{aligned}$$

On décompose la variance résiduelle de la manière suivante :

$$\text{Var}(L_n(X)) - s^2 = \sum_{i,j} I_{i,j} = \sum_{k=0}^{n-1} I_{k,k} + \sum_{i \neq j} I_{i,j}, \quad (1.36)$$

où

$$I_{i,j} = \frac{1}{4} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} M_{i,j}(t, s)h(t)h(s) dt ds, \quad (1.37)$$

avec,

$$M_{i,j}(t, s) = K(t_i, t_j) + K(t_i, t_{j+1}) + K(t_{i+1}, t_j) + K(t_{i+1}, t_{j+1}) - 4K(t, s).$$

Développement du terme diagonal $I_{k,k}$, $k = 0, \dots, n - 1$.

On a

$$M_{k,k}(t, s) = K(t_k, t_k) + K(t_k, t_{k+1}) + K(t_{k+1}, t_k) + K(t_{k+1}, t_{k+1}) - 4K(t, s).$$

Comme la fonction d'autocovariance $R(t, s)$ est symétrique, alors $M_{k,k}(t, s)h(t)h(s)$

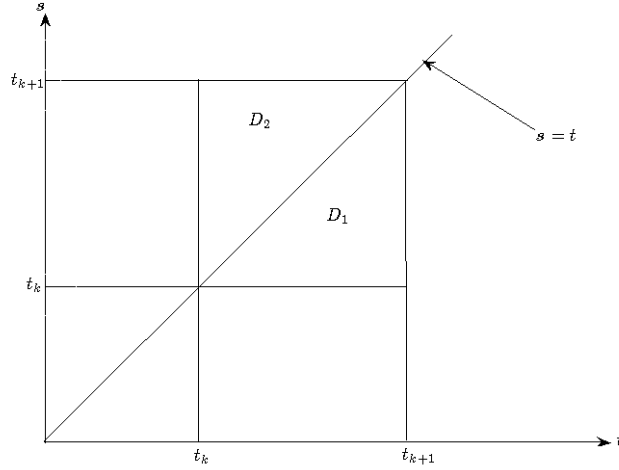


FIG. 1.6 – terme diagonale

est aussi symétrique et donc le terme $I_{k,k}$ peut s'écrire :

$$\begin{aligned} I_{k,k} &= \frac{1}{4} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} M_{k,k}(t, s)h(t)h(s) dt ds = \frac{1}{4} \iint_{D_1 \cup D_2} M_{k,k}(t, s)h(t)h(s) dt ds \\ &= \frac{1}{2} \iint_{D_1} M_{k,k}(t, s)h(t)h(s) dt ds, \end{aligned}$$

où d'après la figure 1.6

$$D_1 = \{(t, s) \in \mathbb{R}^2; t_k < s < t < t_{k+1}\} \text{ et } D_2 = \{(t, s) \in \mathbb{R}^2; t_k < t < s < t_{k+1}\}.$$

D'après l'hypothèse (H2), on peut développer $M_{k,k}(t, s)$ selon la formule de Taylor autour de (t_k, t_k) jusqu'à l'ordre 1. En posant $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, on a

$$\begin{aligned} K(t, s) &= K(t, t_k) + (s - t_k)K^{0,1}(t, \eta_s^1) \\ &= K(t_k, t_k) + (t - t_k)K^{1,0}(\xi_t^1, t_k) + (s - t_k)K^{0,1}(t, \eta_s^1), \end{aligned}$$

où $t_k < \xi_t^1 < t < t_{k+1}$, $t_k < \eta_s^1 < s < t < t_{k+1}$.

$$\begin{aligned} K(t_{k+1}, t_{k+1}) &= K(t_{k+1}, t_k) + \Delta t_k K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^2) \\ &= K(t_k, t_k) + \Delta t_k K^{1,0}(\xi_k^2, t_k) + \Delta t_k K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^2), \end{aligned}$$

où les points intermédiaires sont tels que $t_k < \xi_k^2 < t_{k+1}$, $t_k < \eta_k^2 < t_{k+1}$.

$$K(t_{k+1}, t_k) = K(t_k, t_k) + \Delta t_k K^{1,0}(\xi_k^3, t_k),$$

où $t_k < \xi_k^3 < t_{k+1}$. En regroupant les trois développements, on obtient

$$M_{k,k}(t, s) = \Delta t_k \left(K^{1,0}(\xi_k^2, t_k) + 2K^{1,0}(\xi_k^3, t_k) \right) - 4(t - t_k)K^{1,0}(\xi_k^1, t_k) \\ + \Delta t_k K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^2) - 4(s - t_k)K^{0,1}(t, \eta_s^1).$$

Il est facile de vérifier que pour tous nombre entiers l, l'

$$\iint_{D_1} (t - t_k)^l (s - t_k)^{l'} dt ds = \frac{(\Delta t_k)^{l+l'+2}}{(l+l'+2)(l'+1)}. \quad (1.38)$$

En utilisant le Théorème de la moyenne pour les intégrales, on peut écrire

$$I_{k,k} = \frac{1}{12} \Delta^3 t_k K^{1,0}(a_k, b_k) h(a_k) h(b_k) \\ - \frac{1}{12} \Delta^3 t_k K^{0,1}(a'_k, b'_k) h(a'_k) h(b'_k),$$

où $t_k < b_k < a_k < t_{k+1}, t_k < b'_k < a'_k < t_{k+1}$.

En utilisant $\Delta t_k = \frac{1}{nh(c_k)}$, $t_k < c_k < t_{k+1}$, le terme diagonal $I_{k,k}$ peut finalement s'écrire

$$I_{k,k} = \frac{1}{12n^2} K^{1,0}(a_k, b_k) \frac{h(a_k)h(b_k)}{h^2(c_k)} \Delta t_k \\ - \frac{1}{12n^2} K^{0,1}(a'_k, b'_k) \frac{h(a'_k)h(b'_k)}{h^2(c_k)} \Delta t_k.$$

Comme $\frac{h(a_k)h(b_k)}{h^2(c_k)} \rightarrow 1, \frac{h(a'_k)h(b'_k)}{h^2(c_k)} \rightarrow 1$ quand $n \rightarrow \infty$

il s'ensuit que par l'intégration de Riemann,

$$n^2 \sum_{k=0}^{n-1} I_{k,k} \longrightarrow -\frac{1}{12} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{1,0}(t+, t)) dt,$$

mais par symétrie, on a $K^{1,0}(t+, t) = K^{0,1}(t, t+)$, on obtient alors l'expression asymptotique finale pour le terme diagonal

$$n^2 \sum_{k=0}^{n-1} I_{k,k} \longrightarrow -\frac{1}{12} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+)) dt. \quad (1.39)$$

Développement du terme $I_{i,j}$, $i \neq j$ ($i, j = 0, \dots, n-1$) en (1.37)

D'après l'hypothèse (H1), on peut développer $M_{i,j}(t, s)$ selon la formule de Taylor autour de (t_i, t_j) , $i \neq j$ jusqu'à l'ordre 2 :

$$K(t, s) = K(t_i, t_j) + (t - t_i)K^{1,0}(t_i, t_j) + (s - t_j)K^{0,1}(t_i, t_j) \\ + \frac{1}{2}(t - t_i)^2 K^{2,0}(\xi_i^1, t_j) + \frac{1}{2}(s - t_j)^2 K^{0,2}(t_i, \eta_j^1) + (t - t_i)(s - t_j)K^{1,1}(\xi_i^1, \eta_j^1),$$

où les points intermédiaires ξ_i^1, η_j^1 sont tels que $t_i < \xi_i^1 < t_{i+1}, t_j < \eta_j^1 < t_{j+1}$.

$$K(t_i, t_{j+1}) = K(t_i, t_j) + \Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) + \frac{1}{2} \Delta^2 t_j K^{0,2}(t_i, \eta_j^2),$$

où $t_j < \eta_j^2 < t_{j+1}$.

$$K(t_{i+1}, t_j) = K(t_i, t_j) + \Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) + \frac{1}{2} \Delta^2 t_i K^{2,0}(\xi_i^2, t_j)$$

où $t_i < \xi_i^2 < t_{i+1}$.

$$\begin{aligned} K(t_{i+1}, t_{j+1}) &= K(t_i, t_j) + \Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) + \Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta^2 t_i K^{2,0}(\xi_i^3, t_j) + \frac{1}{2} \Delta^2 t_j K^{0,2}(t_i, \eta_j^3) + \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^3, \eta_j^3), \end{aligned}$$

où $t_i < \xi_i^3 < t_{i+1}, t_j < \eta_j^3 < t_{j+1}$.

En regroupant les différents développements, on obtient

$$\begin{aligned} M_{i,j}(t, s) &= K(t_i, t_j) + K(t_i, t_{j+1}) + K(t_{i+1}, t_j) + K(t_{i+1}, t_{j+1}) - 4K(t, s) \\ &= 2\Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) - 4(s - t_j) K^{0,1}(t_i, t_j) \\ &\quad + 2\Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) - 4(t - t_i) K^{1,0}(t_i, t_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta^2 t_j (K^{0,2}(t_i, \eta_j^2) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^3)) - 2(s - t_j)^2 K^{0,2}(t_i, \eta_j^1) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta^2 t_i (K^{2,0}(\xi_i^2, t_j) + K^{2,0}(\xi_i^3, t_j)) - 2(t - t_i)^2 K^{2,0}(\xi_i^1, t_j) \\ &\quad + \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^3, \eta_j^3) - 4(t - t_i)(s - t_j) K^{1,1}(\xi_i^1, \eta_j^1). \end{aligned}$$

On décompose ensuite le terme $I_{i,j}$ en 5 termes suivants afin de faciliter les calculs :

$$I_{i,j} = \frac{1}{4} \sum_{r=1}^5 I_{i,j}^r,$$

avec

$$\begin{aligned} I_{i,j}^1 &= 2\Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) \mu_{i,0} \mu_{j,0} - 4K^{0,1}(t_i, t_j) \mu_{i,0} \mu_{j,1}, \\ I_{i,j}^2 &= +2\Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) \mu_{i,0} \mu_{j,0} - 4K^{1,0}(t_i, t_j) \mu_{i,1} \mu_{j,0}, \\ I_{i,j}^3 &= +\frac{1}{2} \Delta^2 t_j (K^{0,2}(t_i, \eta_j^2) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^3)) \mu_{i,0} \mu_{j,0} - 2K^{0,2}(t_i, \eta_j^1) \mu_{i,0} \mu_{j,2}, \\ I_{i,j}^4 &= +\frac{1}{2} \Delta^2 t_i (K^{2,0}(\xi_i^2, t_j) + K^{2,0}(\xi_i^3, t_j)) \mu_{i,0} \mu_{j,0} - 2K^{2,0}(\xi_i^1, t_j) \mu_{i,2} \mu_{j,0}, \\ I_{i,j}^5 &= +\Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^3, \eta_j^3) \mu_{i,0} \mu_{j,0} - 4K^{1,1}(\xi_i^1, \eta_j^1) \mu_{i,1} \mu_{j,1}, \end{aligned}$$

où

$$\mu_{i,l} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t - t_i)^l h(t) dt, \mu_{j,l} = \int_{t_j}^{t_{j+1}} (s - t_j)^l h(s) ds. \quad (1.40)$$

Calcul du 1^{er} terme $I_{i,j}^1$:

En développant la densité h selon la formule de Taylor jusqu'à l'ordre 1 et en utilisant le Théorème de la moyenne, on peut vérifier que pour $l = 0, 1, 2$

$$\begin{aligned} \mu_{i,l} &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t - t_i)^l h(t) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t - t_i)^l \left(h(t_i) + (t - t_i)h'(\xi_i^4) \right) dt \\ &= \left(\frac{(\Delta t_i)^{l+1}}{l+1} \right) h(t_i) + \left(\frac{(\Delta t_i)^{l+2}}{l+2} \right) h'(\xi_i^5), \end{aligned} \quad (1.41)$$

où ξ_i^5 est tel que $t_i < \xi_i^5 < t_{i+1}$.

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} I_{i,j}^1 &= K^{0,1}(t_i, t_j) \left(2\Delta t_i \Delta^2 t_j h(t_i) h(t_j) + \Delta t_i \Delta^3 t_j h(t_i) h'(\eta_j^5) \right) \\ &\quad + K^{0,1}(t_i, t_j) \left(\Delta^3 t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^5) h(t_j) + \frac{1}{2} \Delta^2 t_i \Delta^3 t_j h'(\xi_i^5) h'(\eta_j^5) \right) \\ &\quad + K^{0,1}(t_i, t_j) \left(-2\Delta t_i \Delta^2 t_j h(t_i) h(t_j) - \frac{4}{3} \Delta t_i \Delta^3 t_j h(t_i) h'(\eta_j^5) \right) \\ &\quad + K^{0,1}(t_i, t_j) \left(-\Delta^3 t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^5) h(t_j) - \frac{2}{3} \Delta^2 t_i \Delta^3 t_j h'(\xi_i^5) h'(\eta_j^5) \right) \\ &= \Delta t_i \Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) \left(-\frac{1}{3} \Delta^2 t_j h(t_i) h'(\eta_j^5) - \frac{1}{6} \Delta t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^5) h'(\eta_j^5) \right). \end{aligned}$$

En remplaçant $\Delta t_i = \frac{1}{nh(\xi_i^6)}$ et $\Delta t_j = \frac{1}{nh(\eta_j^6)}$ où $t_i < \xi_i^6 < t_{i+1}$, $t_j < \eta_j^6 < t_{j+1}$, le 1^{er} terme devient

$$I_{i,j}^1 = \Delta t_i \Delta t_j K^{0,1}(t_i, t_j) \left(-\frac{1}{3n^2} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^5)}{h^2(\eta_j^6)} - \frac{1}{6n^3} \frac{h'(\xi_i^5) h'(\eta_j^5)}{h(\xi_i^6) h^2(\eta_j^6)} \right).$$

Finalement par l'intégrale de Riemann, l'expression asymptotique du 1^{er} terme est :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j}^1 = -\frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t) h'(s)}{h^2(s)} K^{0,1}(t, s) dt ds.$$

En suivant les mêmes étapes de calcul que précédemment, on obtient pour les autres quatre termes :

$$\begin{aligned} I_{i,j}^2 &= \Delta t_i \Delta t_j K^{1,0}(t_i, t_j) H_{i,j}^2, \\ I_{i,j}^3 &= \Delta t_i \Delta t_j \left(K^{0,2}(t_i, \eta_j^2) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^3) \right) H_{i,j}^{3,1} + \Delta t_i \Delta t_j K^{0,2}(t_i, \eta_j^1) H_{i,j}^{3,2}, \\ I_{i,j}^4 &= \Delta t_i \Delta t_j \left(K^{2,0}(\xi_i^2, t_j) + K^{2,0}(\xi_i^3, t_j) \right) H_{i,j}^{4,1} + \Delta t_i \Delta t_j K^{2,0}(\xi_i^1, t_j) H_{i,j}^{4,2}, \\ I_{i,j}^5 &= \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^3, \eta_j^3) H_{i,j}^{5,1} + \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^1, \eta_j^1) H_{i,j}^{5,2}, \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
 H_{i,j}^2 &= -\frac{1}{3n^2} \frac{h'(\xi_i^7)h(t_j)}{h^2(\xi_i^8)} - \frac{1}{6n^3} \frac{h'(\xi_i^7)h'(\eta_j^7)}{h^2(\xi_i^8)h(\eta_j^8)}, \\
 H_{i,j}^{3,1} &= \frac{1}{2n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h^2(\eta_j^{10})} + \frac{1}{4n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^9)}{h^3(\eta_j^{10})} + \frac{1}{4n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^9)}{h(\xi_i^{10})h^2(\eta_j^{10})} + \frac{1}{8n^4} \frac{h'(\xi_i^9)h'(\eta_j^9)}{h(\xi_i^{10})h^3(\eta_j^{10})}, \\
 H_{i,j}^{3,2} &= -\frac{2}{3n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h^2(\eta_j^{10})} - \frac{1}{2n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^9)}{h^3(\eta_j^{10})} - \frac{1}{3n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^9)}{h(\xi_i^{10})h^2(\eta_j^{10})} - \frac{1}{4n^4} \frac{h'(\xi_i^9)h'(\eta_j^9)}{h(\xi_i^{10})h^3(\eta_j^{10})}, \\
 H_{i,j}^{4,1} &= \frac{1}{2n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h^2(\xi_i^{12})} + \frac{1}{4n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^{11})}{h^3(\xi_i^{12})} + \frac{1}{4n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^{11})}{h^2(\xi_i^{12})h(\eta_j^{12})} + \frac{1}{8n^4} \frac{h'(\xi_i^{11})h'(\eta_j^{11})}{h^3(\xi_i^{12})h(\eta_j^{12})}, \\
 H_{i,j}^{4,2} &= -\frac{2}{3n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h^2(\xi_i^{12})} - \frac{1}{2n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^{11})}{h^3(\xi_i^{12})} - \frac{1}{3n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^{11})}{h^2(\xi_i^{12})h(\eta_j^{12})} - \frac{1}{4n^4} \frac{h'(\xi_i^{11})h'(\eta_j^{11})}{h^3(\xi_i^{12})h(\eta_j^{12})}, \\
 H_{i,j}^{5,1} &= \frac{1}{n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h(\xi_i^{14})h(\eta_j^{14})} + \frac{1}{2n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^{13})}{h^2(\xi_i^{14})h(\eta_j^{14})} + \frac{1}{2n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^{13})}{h(\xi_i^{14})h^2(\eta_j^{14})} + \frac{1}{4n^4} \frac{h'(\xi_i^{13})h'(\eta_j^{13})}{h^2(\xi_i^{14})h^2(\eta_j^{14})}, \\
 H_{i,j}^{5,2} &= -\frac{1}{n^2} \frac{h(t_i)h(t_j)}{h(\xi_i^{14})h(\eta_j^{14})} - \frac{2}{3n^3} \frac{h(t_j)h'(\xi_i^{13})}{h^2(\xi_i^{14})h(\eta_j^{14})} - \frac{2}{3n^3} \frac{h(t_i)h'(\eta_j^{13})}{h(\xi_i^{14})h^2(\eta_j^{14})} - \frac{4}{9n^4} \frac{h'(\xi_i^{13})h'(\eta_j^{13})}{h^2(\xi_i^{14})h^2(\eta_j^{14})}.
 \end{aligned}$$

De même, l'expression asymptotique de ces termes est obtenue par l'intégrale de Riemann

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j}^2 &= -\frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(s)h'(t)}{h^2(t)} K^{1,0}(t,s) dt ds \\
 &= -\frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t)h'(s)}{h^2(s)} K^{0,1}(t,s) dt ds, \\
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j}^3 &= \frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t)}{h(s)} K^{0,2}(t,s) dt ds, \\
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j}^4 &= \frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(s)}{h(t)} K^{2,0}(t,s) dt ds \\
 &= \frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t)}{h(s)} K^{0,2}(t,s) dt ds, \\
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j}^5 &= 0.
 \end{aligned}$$

En regroupant ces expressions asymptotiques, on obtient le résultat asymptotique du terme $I_{i,j}$, $i \neq j$ en (1.37)

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} I_{i,j} &= \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 h(t) \left(\frac{K^{0,2}(t,s)h(s) - h'(s)K^{0,1}(t,s)}{h^2(s)} \right) dt ds \\
 &= \frac{1}{6} \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t,s)}{h(s)} \right) \right) h(t) dt
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{6} \int_0^1 \left(\int_0^t \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t, s)}{h(s)} \right) + \int_t^1 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t, s)}{h(s)} \right) \right) h(t) dt \\
 &= \frac{1}{6} \int_0^1 \left(\left[\frac{K^{0,1}(t, t-)}{h(t)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right] + \left[\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, t+)}{h(t)} \right] \right) h(t) dt \\
 &= \frac{1}{6} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+)) dt \\
 &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \left(\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) dt.
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

En utilisant la formule (1.36) et en combinant les deux résultats (1.39) et (1.42), on obtient finalement (1.22).

Preuve du lemme 1.4.2

On a écrit dans la preuve du lemme 1.4.1,

$$I(f) = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} K(t, s) h(t) h(s) dt ds.$$

L'estimateur (deterministe) des trapèzes $L_n(f)$ peut aussi s'écrire :

$$\begin{aligned}
 L_n(f) &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\left(\frac{f\varphi}{h} \right)(t_i) + \left(\frac{f\varphi}{h} \right)(t_{i+1}) \right) \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \int_0^1 (K(t_i, s) + K(t_{i+1}, s)) h(s) ds \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} (K(t_i, s) + K(t_{i+1}, s)) h(s) ds,
 \end{aligned}$$

et comme $\frac{1}{n} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} h(t) dt$, alors

$$L_n(f) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} (K(t_i, s) + K(t_{i+1}, s)) h(t) h(s) dt ds.$$

La différence entre les deux termes peut s'écrire sous la forme

$$I(f) - L_n(f) = \sum_{i,j} W_{i,j} = \sum_{k=0}^{n-1} W_{k,k} + \sum_{i \neq j} W_{i,j}, \tag{1.43}$$

où

$$W_{i,j} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} Q_{i,j}(t, s) h(t) h(s) dt ds, \tag{1.44}$$

avec,

$$Q_{i,j}(t, s) = K(t, s) - \frac{1}{2} (K(t_i, s) + K(t_{i+1}, s)).$$

Développement du terme diagonal $W_{k,k}$, $k = 0, \dots, n - 1$

On peut décomposer le terme $W_{k,k}$ suivant les deux régions D_1 et D_2 (voir Figure 1.6)

$$\begin{aligned}
 W_{k,k} &= \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} Q_{k,k}(t, s) h(t) h(s) dt ds \\
 &= \iint_{D_1 \cup D_2} Q_{k,k}(t, s) h(t) h(s) dt ds \\
 &= \iint_{D_1} Q_{k,k}(t, s) h(t) h(s) dt ds \\
 &\quad + \iint_{D_2} Q_{k,k}(t, s) h(t) h(s) dt ds \\
 &= W_{k,k}^1 + W_{k,k}^2.
 \end{aligned} \tag{1.45}$$

On se concentre d'abord sur le 1^{er} terme $W_{k,k}^1$, $k = 0, \dots, n - 1$:

D'après l'hypothèse (H2), on peut développer $Q_{k,k}(t, s)$ selon la formule de Taylor autour de (t_k, t_k) jusqu'à l'ordre 1. En posant $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, on a

$$\begin{aligned}
 K(t, s) &= K(t, t_k) + (s - t_k) K^{0,1}(t, \eta_k^4) \\
 &= K(t_k, t_k) + (t - t_k) K^{1,0}(\xi_k^4, t_k) + (s - t_k) K^{0,1}(t, \eta_k^4),
 \end{aligned}$$

où les points intermédiaires sont tels que

$$t_k < \xi_k^4 < t < t_{k+1}, t_k < \eta_k^4 < s < t < t_{k+1}.$$

$$\begin{aligned}
 K(t_k, s) &= K(s, t_k) \\
 &= K(t_k, t_k) + (s - t_k) K^{1,0}(\xi_k^5, t_k),
 \end{aligned}$$

où $t_k < \xi_k^5 < s < t < t_{k+1}$.

$$\begin{aligned}
 K(t_{k+1}, s) &= K(t_{k+1}, t_k) + (s - t_k) K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^6) \\
 &= K(t_k, t_k) + \Delta t_k K^{1,0}(\xi_k^6, t_k) + (s - t_k) K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^6),
 \end{aligned}$$

où $t_k < \xi_k^6 < t_{k+1}, t_k < \eta_k^6 < s < t < t_{k+1}$.

En regroupant les différents développements, on obtient

$$\begin{aligned}
 Q_{k,k}(t, s) &= K(t, s) - \frac{1}{2} (K(t_k, s) + K(t_{k+1}, s)) \\
 &= (t - t_k) K^{1,0}(\xi_k^4, t_k) - \frac{1}{2} \Delta t_k K^{1,0}(\xi_k^6, t_k) - \frac{1}{2} (s - t_k) K^{1,0}(\xi_k^5, t_k) \\
 &\quad + (s - t_k) K^{0,1}(t, \eta_k^4) - \frac{1}{2} (s - t_k) K^{0,1}(t_{k+1}, \eta_k^6).
 \end{aligned}$$

En utilisant (1.38) et le Théorème de la moyenne pour les intégrales, on peut écrire

$$\begin{aligned}
 W_{k,k}^1 &= \frac{1}{12} \Delta^3 t_k K^{0,1}(a_k, b_k) h(a_k) h(b_k) \\
 &= \frac{1}{12n^2} K^{0,1}(a_k, b_k) \frac{h(a_k) h(b_k)}{h^2(c_k)} \Delta t_k,
 \end{aligned}$$

où $t_k < b_k < a_k < t_{k+1}$, $t_k < c_k < t_{k+1}$.

Il s'ensuit que par l'intégration de Riemann, et comme

$\frac{h(a_k)h(b_k)}{h^2(c_k)} \rightarrow 1$ quand $n \rightarrow \infty$

$$n^2 \sum_{k=0}^{n-1} W_{k,k}^1 \longrightarrow \frac{1}{12} \int_0^1 K^{0,1}(t, t-) dt. \quad (1.46)$$

Pour le deuxième terme $W_{k,k}^2$; $k = 0, \dots, n-1$:

De la même manière que le terme $W_{k,k}^1$, on obtient

$$\begin{aligned} W_{k,k}^2 &= -\frac{1}{12} \Delta^3 t_k K^{0,1}(a'_k, b'_k) h(a'_k) h(b'_k) \\ &= -\frac{1}{12n^2} K^{0,1}(a'_k, b'_k) \frac{h(a'_k) h(b'_k)}{h^2(c'_k)} \Delta t_k, \end{aligned}$$

où $t_k < a'_k < b'_k < t_{k+1}$, $t_k < c'_k < t_{k+1}$.

Il s'ensuit que par l'intégration de Riemann,

$$n^2 \sum_{k=0}^{n-1} W_{k,k}^2 \longrightarrow -\frac{1}{12} \int_0^1 K^{0,1}(t, t+) dt. \quad (1.47)$$

En combinant (1.45) et (1.46) et (1.47), on obtient

$$n^2 \sum_{k=0}^{n-1} W_{k,k} \longrightarrow \frac{1}{12} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+)) dt. \quad (1.48)$$

Développement du terme $W_{i,j}$, $i \neq j$ ($i, j = 0, \dots, n-1$) en (1.44)

D'après l'hypothèse (H1), on peut développer $Q_{i,j}(t, s)$ selon la formule de Taylor autour de (t_i, t_j) , $i \neq j$ jusqu'à l'ordre 2

$$\begin{aligned} K(t, s) &= K(t_i, t_j) + (t - t_i) K^{1,0}(t_i, t_j) + (s - t_j) K^{0,1}(t_i, t_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} (t - t_i)^2 K^{2,0}(\xi_i^{15}, t_j) + \frac{1}{2} (s - t_j)^2 K^{0,2}(t_i, \eta_j^{15}) + (t - t_i)(s - t_j) K^{1,1}(\xi_i^{15}, \eta_j^{15}), \end{aligned}$$

où les points intermédiaires ξ_i^{15}, η_j^{15} sont tels que $t_i < \xi_i^{15} < t_{i+1}$, $t_j < \eta_j^{15} < t_{j+1}$.

$$K(t_i, s) = K(t_i, t_j) + (s - t_j) K^{0,1}(t_i, t_j) + \frac{1}{2} (s - t_j)^2 K^{0,2}(t_i, \eta_j^{16}),$$

où $t_j < \eta_j^{16} < t_{j+1}$.

$$\begin{aligned} K(t_{i+1}, s) &= K(t_i, t_j) + \Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) + (s - t_j) K^{0,1}(t_i, t_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \Delta^2 t_i K^{2,0}(\xi_i^{17}, t_j) + \frac{1}{2} (s - t_j)^2 K^{0,2}(t_i, \eta_j^{17}) + \Delta t_i (s - t_j) K^{1,1}(\xi_i^{17}, \eta_j^{17}), \end{aligned}$$

où $t_i < \xi_i^{17} < t_{i+1}, t_j < \eta_j^{17} < t_{j+1}$.

En regroupant les différents développements, on obtient

$$\begin{aligned}
 Q_{i,j}(t, s) &= K(t, s) - \frac{1}{2}(K(t_i, s) + K(t_{i+1}, s)) \\
 &= (t - t_i)K^{1,0}(t_i, t_j) - \frac{1}{2}\Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j) \\
 &\quad + \frac{1}{2}(t - t_i)^2 K^{2,0}(\xi_i^{15}, t_j) - \frac{1}{4}\Delta^2 t_i K^{2,0}(\xi_i^{17}, t_j) \\
 &\quad + \frac{1}{2}(s - t_j)^2 \left[K^{0,2}(t_i, \eta_j^{15}) - \frac{1}{2}(K^{0,2}(t_i, \eta_j^{16}) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^{17})) \right] \\
 &\quad + (t - t_i)(s - t_j)K^{1,1}(\xi_i^{15}, \eta_j^{15}) - \frac{1}{2}\Delta t_i (s - t_j)K^{1,1}(\xi_i^{17}, \eta_j^{17}).
 \end{aligned}$$

On décompose ensuite le terme $W_{i,j}$ en quatre termes suivants afin de faciliter les calculs :

$$W_{i,j} = \sum_{r=1}^4 W_{i,j}^r,$$

avec

$$\begin{aligned}
 W_{i,j}^1 &= K^{1,0}(t_i, t_j)\mu_{i,1}\mu_{j,0} - \frac{1}{2}\Delta t_i K^{1,0}(t_i, t_j)\mu_{i,0}\mu_{j,0}, \\
 W_{i,j}^2 &= \frac{1}{2}K^{2,0}(\xi_i^{15}, t_j)\mu_{i,2}\mu_{j,0} - \frac{1}{4}\Delta^2 t_i K^{2,0}(\xi_i^{17}, t_j)\mu_{i,0}\mu_{j,0}, \\
 W_{i,j}^3 &= \frac{1}{2} \left[K^{0,2}(t_i, \eta_j^{15}) - \frac{1}{2}(K^{0,2}(t_i, \eta_j^{16}) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^{17})) \right] \mu_{i,0}\mu_{j,2}, \\
 W_{i,j}^4 &= K^{1,1}(\xi_i^{15}, \eta_j^{15})\mu_{i,1}\mu_{j,1} - \frac{1}{2}\Delta t_i K^{1,1}(\xi_i^{17}, \eta_j^{17})\mu_{i,0}\mu_{j,1},
 \end{aligned}$$

où $\mu_{i,l}, l = 0, 1, 2$ est défini par (1.40).

Calcul du 1^{er} terme $W_{i,j}^1$:

En développant la densité h selon la formule de Taylor jusqu'à l'ordre 1 et en utilisant (1.41), il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
 W_{i,j}^1 &= K^{1,0}(t_i, t_j) \left(\frac{1}{2}\Delta^2 t_i \Delta t_j h(t_i)h(t_j) + \frac{1}{4}\Delta^2 t_i \Delta^2 t_j h(t_i)h'(\eta_j^{18}) \right) \\
 &\quad + K^{1,0}(t_i, t_j) \left(\frac{1}{3}\Delta^3 t_i \Delta t_j h'(\xi_i^{18})h(t_j) + \frac{1}{6}\Delta^3 t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^{18})h'(\eta_j^{18}) \right) \\
 &\quad + K^{1,0}(t_i, t_j) \left(-\frac{1}{2}\Delta^2 t_i \Delta t_j h(t_i)h(t_j) - \frac{1}{4}\Delta^2 t_i \Delta^2 t_j h(t_i)h'(\eta_j^{18}) \right) \\
 &\quad + K^{1,0}(t_i, t_j) \left(-\frac{1}{4}\Delta^3 t_i \Delta t_j h'(\xi_i^{18})h(t_j) - \frac{1}{8}\Delta^3 t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^{18})h'(\eta_j^{18}) \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= K^{1,0}(t_i, t_j) \left(\frac{1}{12} \Delta^3 t_i \Delta t_j h'(\xi_i^{18}) h(t_j) + \frac{1}{24} \Delta^3 t_i \Delta^2 t_j h'(\xi_i^{18}) h'(\eta_j^{18}) \right) \\
 &= \Delta t_i \Delta t_j K^{1,0}(t_i, t_j) \left(\frac{1}{12} \Delta^2 t_i h'(\xi_i^{18}) h(t_j) + \frac{1}{24} \Delta^2 t_i \Delta t_j h'(\xi_i^{18}) h'(\eta_j^{18}) \right),
 \end{aligned}$$

où $t_i < \xi_i^{18} < t_{i+1}, t_j < \eta_j^{18} < t_{j+1}$.

En remplaçant $\Delta t_i = \frac{1}{nh(\xi_i^{19})}$ et $\Delta t_j = \frac{1}{nh(\eta_j^{19})}$ où $t_i < \xi_i^{19} < t_{i+1}, t_j < \eta_j^{19} < t_{j+1}$, le 1^{er} terme devient

$$W_{i,j}^1 = \Delta t_i \Delta t_j K^{1,0}(t_i, t_j) H_{i,j}^6,$$

où

$$H_{i,j}^6 = \frac{1}{12n^2} \frac{h'(\xi_i^{18}) h(t_j)}{h^2(\xi_i^{19})} + \frac{1}{24n^3} \frac{h'(\xi_i^{18}) h'(\eta_j^{18})}{h^2(\xi_i^{19}) h(\eta_j^{19})}.$$

Finalement par l'intégrale de Riemann, l'expression asymptotique du 1^{er} terme est :

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} W_{i,j}^1 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(s) h'(t)}{h^2(t)} K^{1,0}(t, s) dt ds \\
 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t) h'(s)}{h^2(s)} K^{0,1}(t, s) dt ds.
 \end{aligned}$$

En suivant les mêmes étapes de calcul que précédemment, on obtient pour les autres trois termes :

$$\begin{aligned}
 W_{i,j}^2 &= \Delta t_i \Delta t_j K^{2,0}(\xi_i^{15}, t_j) H_{i,j}^{7,1} + \Delta t_i \Delta t_j K^{2,0}(\xi_i^{17}, t_j) H_{i,j}^{7,2}, \\
 W_{i,j}^3 &= \Delta t_i \Delta t_j \left[K^{0,2}(t_i, \eta_j^{15}) - \frac{1}{2} (K^{0,2}(t_i, \eta_j^{16}) + K^{0,2}(t_i, \eta_j^{17})) \right] H_{i,j}^8, \\
 W_{i,j}^4 &= \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^{15}, \eta_j^{15}) H_{i,j}^{9,1} + \Delta t_i \Delta t_j K^{1,1}(\xi_i^{17}, \eta_j^{17}) H_{i,j}^{9,2},
 \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
 H_{i,j}^{7,1} &= \frac{1}{6n^2} \frac{h(t_i) h(t_j)}{h^2(\xi_i^{21})} + \frac{1}{12n^3} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^{20})}{h^2(\xi_i^{21}) h(\eta_j^{21})} + \frac{1}{8n^2} \frac{h(t_j) h'(\xi_i^{20})}{h^2(\xi_i^{21})} + \frac{1}{16n^3} \frac{h'(\xi_i^{20}) h'(\eta_j^{20})}{h^2(\xi_i^{21}) h(\eta_j^{21})}, \\
 H_{i,j}^{7,2} &= -\frac{1}{4n^2} \frac{h(t_i) h(t_j)}{h^2(\xi_i^{21})} - \frac{1}{8n^3} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^{20})}{h^2(\xi_i^{21}) h(\eta_j^{21})} - \frac{1}{8n^3} \frac{h(t_j) h'(\xi_i^{20})}{h^3(\xi_i^{21})} - \frac{1}{16n^4} \frac{h'(\xi_i^{20}) h'(\eta_j^{20})}{h^3(\xi_i^{21}) h(\eta_j^{21})}, \\
 H_{i,j}^8 &= \frac{1}{6n^2} \frac{h(t_i) h(t_j)}{h^2(\eta_j^{23})} + \frac{1}{12n^3} \frac{h(t_j) h'(\xi_i^{22})}{h(\xi_i^{23}) h^2(\eta_j^{23})} + \frac{1}{8n^3} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^{22})}{h^3(\eta_j^{23})} + \frac{1}{16n^4} \frac{h'(\xi_i^{22}) h'(\eta_j^{22})}{h(\xi_i^{23}) h^3(\eta_j^{23})}, \\
 H_{i,j}^{9,1} &= \frac{1}{4n^2} \frac{h(t_i) h(t_j)}{h(\xi_i^{25}) h(\eta_j^{25})} + \frac{1}{6n^3} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^{24})}{h(\xi_i^{25}) h^2(\eta_j^{25})} + \frac{1}{6n^3} \frac{h(t_j) h'(\xi_i^{24})}{h^2(\xi_i^{25}) h(\eta_j^{25})} + \frac{1}{9n^4} \frac{h'(\xi_i^{24}) h'(\eta_j^{24})}{h^2(\xi_i^{25}) h^2(\eta_j^{25})}, \\
 H_{i,j}^{9,2} &= -\frac{1}{4n^2} \frac{h(t_i) h(t_j)}{h(\xi_i^{27}) h(\eta_j^{27})} - \frac{1}{6n^3} \frac{h(t_i) h'(\eta_j^{26})}{h(\xi_i^{27}) h^2(\eta_j^{27})} - \frac{1}{8n^3} \frac{h(t_j) h'(\xi_i^{26})}{h^2(\xi_i^{27}) h(\eta_j^{27})} - \frac{1}{12n^4} \frac{h'(\xi_i^{26}) h'(\eta_j^{26})}{h^2(\xi_i^{27}) h^2(\eta_j^{27})}.
 \end{aligned}$$

Finalemment par l'intégrale de Riemann, les expressions asymptotiques de ces termes sont :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} W_{i,j}^2 &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(s)}{h(t)} K^{2,0}(t, s) dt ds \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \frac{h(t)}{h(s)} K^{0,2}(t, s) dt ds, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} W_{i,j}^3 &= 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} W_{i,j}^4 &= 0. \end{aligned}$$

En regroupant ces deux expressions asymptotiques, on obtient le résultat asymptotique du terme $\sum_{i \neq j} W_{i,j}$.

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \sum_{i \neq j} W_{i,j} &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 h(t) \left(\frac{K^{0,2}(t, s)h(s) - h'(s)K^{0,1}(t, s)}{h^2(s)} \right) dt ds \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t, s)}{h(s)} \right) \right) h(t) dt \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\int_0^t \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t, s)}{h(s)} \right) + \int_t^1 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{K^{0,1}(t, s)}{h(s)} \right) \right) h(t) dt \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left[\frac{K^{0,1}(t, t-)}{h(t)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right] + \left[\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, t+)}{h(t)} \right] \right) h(t) dt \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 (K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+)) dt \\ &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\frac{K^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) dt. \end{aligned} \tag{1.49}$$

En utilisant la formule (1.43) et en combinant les deux résultats (1.48) et (1.49), on obtient finalement (1.23).

Preuve du lemme 1.4.3

D'après les définitions de $K(t, s)$ et $\alpha(t)$ en (1.21) et (1.3), on a

$$\begin{aligned} K^{0,1}(t, t+) &= \lim_{s \uparrow t} \frac{\partial K(t, s)}{\partial s} \\ &= \left(\frac{\varphi^2}{h^2} \right)(t) R^{0,1}(t, t+) + \left(\frac{\varphi}{h} \right)(t) R(t, t) \left(\frac{\varphi}{h} \right)'(t), \\ K^{0,1}(t, t-) &= \lim_{s \downarrow t} \frac{\partial K(t, s)}{\partial s} \\ &= \left(\frac{\varphi^2}{h^2} \right)(t) R^{0,1}(t, t-) + \left(\frac{\varphi}{h} \right)(t) R(t, t) \left(\frac{\varphi}{h} \right)'(t). \end{aligned}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} K^{0,1}(t, t-) - K^{0,1}(t, t+) &= (R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+)) \left(\frac{\varphi^2}{h^2}\right)(t) \\ &= \alpha(t) \left(\frac{\varphi^2}{h^2}\right)(t). \end{aligned}$$

Preuve du Théorème 1.4.2

En utilisant la formule (1.19) et en combinant les résultats des lemmes 1.4.1, 1.4.2 et 1.4.3 et le fait que

$$L_n(f) \longrightarrow s^2 = I(f) \text{ quand } n \rightarrow \infty,$$

on obtient finalement (1.25).

On montre que le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (1.10), est asymptotiquement optimal. Pour cela, on minimise la constante asymptotique en posant :

$$D_{\alpha, \varphi}(h) = \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt,$$

par une application directe de l'inégalité de Hölder de paramètres $p = 3$, $q = \frac{3}{2}$, on obtient

$$\begin{aligned} D_{\alpha, \varphi}(h^*) &= \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) \varphi^2(t) \}^{1/3} dt \right)^3 \\ &= \left(\int_0^1 \left(\alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} \right)^{1/3} h^{2/3}(t) dt \right)^3 \\ &\leq \left(\int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \right) \left(\int_0^1 h(t) dt \right)^2 \\ &= D_{\alpha, \varphi}(h), \end{aligned}$$

où h désigne une densité positive arbitraire dans l'intervalle $[0, 1]$. En utilisant le Théorème 1.3.1, on en déduit que $\mathbf{T}_n^* = \mathbf{T}_n(h^*)$ est asymptotiquement optimal.

Preuve du Corollaire 1.3.2

En utilisant le résultat du Théorème 1.3.1 et l'égalité triviale suivante

$$\inf_{\mathbf{T}_n} \text{Var}(L_n^{\text{blue}}(g)) = z_1^2 \inf_{\mathbf{T}_n} \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}),$$

on obtient (1.12).

Preuve du Corollaire 1.4.1

On remplace en (1.25) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (1.10).

Preuve du Corollaire 1.4.2

On profite de (1.25) et les expressions suivantes

$$\begin{aligned}\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) &= z_1^2 \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \\ \text{Var}(L(g)) &= z_1^2 \text{Var}(\hat{\beta}) = z_1^2 s^{-2},\end{aligned}$$

pour obtenir (1.26).

Preuve du Corollaire 1.4.3

Le raisonnement est identique au Corollaire 1.3.2

Preuve du Corollaire 1.4.4

On remplace en (1.26) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (1.10).

1.8.3 Preuve du Théorème 1.5.1

On rappelle que

$$\begin{aligned}\text{Var}(L_{a,n}(X)) &= \text{Var}(L_n(X)) + 2\text{Cov}\left(L_n(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l)\right) \\ &\quad + \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^L b_l R(a_l, a_j) b_j \\ \text{Var}(I_a(X)) &= s_L^2 = \text{Var}(I(X)) + 2\text{Cov}\left(I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l)\right) \\ &\quad + \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^L b_l R(a_l, a_j) b_j.\end{aligned}$$

En prenant la différence des deux variances, on écrit

$$\begin{aligned}\text{Var}(L_{a,n}(X)) - s_L^2 &= (\text{Var}(L_n(X)) - \text{Var}(I(X))) \\ &\quad + 2\text{Cov}\left(L_n(X) - I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l)\right)\end{aligned}$$

$$\text{et } I_a(f) - L_{a,n}(f) = I(f) - L_n(f).$$

On étudie d'abord la vitesse de convergence du terme covariance qu'on peut développer comme suit :

$$\begin{aligned}\text{Cov}\left(L_n(X) - I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l)\right) &= \\ \sum_{l=1}^L b_l \left(\frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} (R(t_k, a_l)u(t_k) + R(t_{k+1}, a_l)u(t_{k+1})) \right) \\ - \sum_{l=1}^L b_l \left(\sum_{k=0}^{n-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (uh)(t)R(t, a_l) dt \right).\end{aligned}$$

La fonction $u(t) = (\varphi/h)(t)$ est deux fois continûment différentiable d'après l'hypothèse (H4), on peut donc développer $u(t)$ et $h(t)$ selon la formule de Taylor autour de t_k jusqu'à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} u(t) &= u(t_k) + (t - t_k)u^{(1)}(t_k) + \frac{(t - t_k)^2}{2}u^{(2)}(t_k) + o((t - t_k)^2) \\ h(t) &= h(t_k) + (t - t_k)h^{(1)}(t_k) + \frac{(t - t_k)^2}{2}h^{(2)}(t_k) + o((t - t_k)^2). \end{aligned}$$

D'après l'hypothèse (H1), on peut développer $R(t, a_l)$ selon la formule de Taylor autour de (t_k, a_l) jusqu'à l'ordre 2.

$$R(t, a_l) = R(t_k, a_l) + (t - t_k)R^{1,0}(t_k, a_l) + \frac{(t - t_k)^2}{2}R^{2,0}(t_k, a_l) + o((t - t_k)^2).$$

En utilisant l'intégrale de Riemann, on obtient lorsque $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} n^2 Cov \left(L_n(X) - I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l) \right) \longrightarrow \\ \frac{1}{12} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ \int_0^1 \left(\frac{u^{(2)}(t)R(t, a_l)}{h(t)} + \frac{2u^{(1)}(t)R^{1,0}(t, a_l)}{h(t)} + \frac{u(t)R^{2,0}(t, a_l)}{h(t)} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{u^{(1)}(t)h^{(1)}(t)R(t, a_l)}{h^2(t)} - \frac{u(t)h^{(1)}(t)R^{1,0}(t, a_l)}{h^2(t)} \right) dt \right\}. \end{aligned}$$

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\begin{aligned} n^2 Cov \left(L_n(X) - I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l) \right) \longrightarrow \\ \frac{1}{12} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - R(0, a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right. \\ \left. + R^{1,0}(1, a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (1) - R^{1,0}(0, a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (0) \right\} \end{aligned}$$

où $a_l \neq 0$ ou $1 \quad \forall l = 1, \dots, L$. Alors

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 (\text{Var}(L_{a,n}(X)) - s_L^2) &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 (\text{Var}(L_n(X)) - \text{Var}(I(X))) \\ &+ 2 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 Cov \left(L_n(X) - I(X), \sum_{l=1}^L b_l X(a_l) \right). \end{aligned}$$

En utilisant la décomposition

$$\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}_a) = \left(\frac{\text{Var}(L_{a,n}(X)) - s_L^2}{(L_{a,n})^2(f)} \right) + \frac{(I_a(f) - L_{a,n}(f))(I_a(f) + L_{a,n}(f))}{(L_{a,n})^2(f)I_a(f)}$$

et en combinant les résultats des lemmes 1.4.1, 1.4.2 et 1.4.3 et le fait que

$$L_{a,n}(f) \longrightarrow s_L^2 = I_a(f) \text{ quand } n \rightarrow \infty,$$

on obtient finalement (1.30).

Preuve du Corollaire 1.5.1

On remplace en (1.30) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (1.10) pour obtenir (1.31).

Preuve du Corollaire 1.5.2

En utilisant (1.30) et les formes suivantes

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_{a,n}^{\text{trap}}(g)) &= z_1^2 \text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) \\ \text{Var}(L_a(g)) &= z_1^2 \text{Var}(\hat{\beta}_a) = z_1^2 s_L^{-2}, \end{aligned}$$

on obtient (1.32).

Preuve du Corollaire 1.5.3

On remplace en (1.32) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (1.10) pour obtenir le résultat.

1.8.4 Preuve du Théorème 1.7.1

La preuve se fait selon les deux étapes suivantes :

- (i) $\sup \{ \Psi_{\alpha,\varphi}(h^*) \mid (\alpha, \varphi) \in \Lambda \} = \epsilon_1 \epsilon_2$
- (ii) $\forall h, \exists (\alpha, \varphi) \in \Lambda : \Psi_{\alpha,\varphi}(h) \geq \epsilon_1 \epsilon_2.$

La première partie (i) est vérifiée par une application directe de l'inégalité de Hölder avec les paramètres $p = 3, q = \frac{3}{2}$

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha,\varphi}(h^*) &= \left\{ \int_0^1 (\alpha(t))^{\frac{1}{3}} (\varphi(t))^{\frac{2}{3}} dt \right\}^3 \\ &\leq \left(\int_0^1 \alpha(t) dt \right) \left(\int_0^1 \varphi(t) dt \right)^2 \leq \epsilon_1 \epsilon_2, \end{aligned}$$

avec égalité pour les fonctions

$$\alpha(t) = \epsilon_1; \varphi(t) = \sqrt{\epsilon_2}.$$

Pour la deuxième partie (ii), soit h désigne une densité positive arbitraire dans l'intervalle $[0, 1]$. Pour un processus d'erreur stationnaire (ou un processus de Wiener de variance égale à ϵ_1) avec

$$\alpha_*(t) = \epsilon_1; \varphi_*(t) = \sqrt{\epsilon_2}.$$

Il s'ensuit que $(\alpha_*, \varphi_*) \in \Lambda$ et

$$\Psi_{\alpha_*,\varphi_*}(h) = \epsilon_1 \epsilon_2 \int_0^1 h^{-2}(t) dt \geq \epsilon_1 \epsilon_2$$

car $\int_0^1 h^{-2}(t) dt \geq 1$ par une application directe de l'inégalité de Hölder de paramètres $p = \frac{3}{2}, q = 3$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^1 (h(t))^{\frac{1}{p}} (h^{-2}(t))^{\frac{1}{q}} dt \\ &\leq \left(\int_0^1 h(t) dt \right)^{\frac{2}{3}} \left(\int_0^1 h^{-2}(t) dt \right)^{\frac{1}{3}} \\ &= \left(\int_0^1 h^{-2}(t) dt \right)^{\frac{1}{3}} . \end{aligned}$$

Cela prouve (ii) et achève la preuve du Théorème 1.7.1.

Chapitre 2

Plans d'expérience pour le modèle de régression multiple

2.1 Estimation paramétrique de l'AUC et plans d'échantillonnage optimaux

On considère le modèle de régression multiple pour la courbe de concentration :

$$X(t) = g(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1], \quad (2.1)$$

où

$$g(t) = \beta_1 f_1(t) + \cdots + \beta_q f_q(t) = \mathbf{f}'(t)\boldsymbol{\beta}$$

et le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est centré et d'autocovariance $\mathbb{E}(\varepsilon(t)\varepsilon(s)) = R(t, s)$, $\boldsymbol{\beta}' = (\beta_1, \dots, \beta_q)$ est un vecteur de paramètres inconnus et $\mathbf{f}'(t) = (f_1(t), \dots, f_q(t))$ est un vecteur de fonctions de régression connues et q est un nombre entier fixé tel que $q \geq 1$.

On reprend les hypothèses du Chapitre 1, mais on remplace les hypothèses (H3) et (H4) par (H3)_i et (H4)_i suivantes.

Hypothèses :

- (H1) Le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est supposé n'avoir aucune dérivée en moyenne quadratique mais que sa fonction d'autocovariance $R(t, s)$ est supposée avoir des dérivées partielles mixtes continues jusqu'à l'ordre deux en dehors de la diagonale ($t \neq s$) du carré unité.
- (H2) Sur la diagonale ($t = s$), on suppose que les limites à gauche et à droite

$$R^{0,1}(t, t-) = \lim_{s \downarrow t} \partial R(t, s) / \partial s, \quad R^{0,1}(t, t+) = \lim_{s \uparrow t} \partial R(t, s) / \partial s,$$

CHAPITRE 2 : Plans d'expérience pour le modèle de régression multiple

existent et sont continues et la fonction de saut de $R^{0,1}$ le long de la diagonale, définie par

$$\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+),$$

est supposée être positive et non identiquement égale à 0.

- (H3)_i Chaque fonction de régression $f_i(t)$, $i = 1, \dots, q$, peut s'écrire sous la forme :

$$f_i(t) = \int_0^1 R(t, s)\varphi_i(s) ds \quad (2.2)$$

où φ_i , $i = 1, \dots, q$, sont des fonctions continues connues sur $[0, 1]$.

- (H4)_i $u_i = \varphi_i/h$ et h , $i = 1, \dots, q$ sont deux fois continûment différentiables.

On veut estimer la surface sous la courbe de la fonction de concentration (AUC) définie par

$$\text{AUC}(g) = \int_0^1 g(t) dt.$$

L'estimateur BLUE $\hat{\beta}$ de β sur tout l'intervalle $[0, 1]$ est défini par

$$\hat{\beta} = \mathbf{S}^{-1} \int_0^1 X(t)\varphi(t) dt, \quad (2.3)$$

où $\varphi'(t) = (\varphi_1(t), \dots, \varphi_q(t))$, et la matrice \mathbf{S} de termes généraux

$$s_{ij} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(t)R(t, s)\varphi_j(s) dt ds, \quad i, j = 1, \dots, q \quad (2.4)$$

est supposée être inversible.

L'erreur quadratique moyenne de cet estimateur est donnée par :

$$\text{EQM}(\hat{\beta}) = \mathbb{E}(\hat{\beta} - \beta)'(\hat{\beta} - \beta) = \text{trace}(\mathbf{S}^{-1}).$$

Alors, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par

$$L(g) = \mathbf{z}'\hat{\beta},$$

où $\mathbf{z}' = (z_1, \dots, z_q)$; $z_i = \int_0^1 f_i(t) dt$, et $f_i(t)$ sont données par (2.2), $i = 1, \dots, q$.

Cet estimateur est sans biais et de variance

$$\text{Var}(L(g)) = \mathbf{z}'\text{Var}(\hat{\beta})\mathbf{z} = \mathbf{z}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{z}.$$

Si $X(t)$ est observé en $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier

CHAPITRE 2 : Plans d'expérience pour le modèle de régression multiple

$\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ dans l'intervalle $[0, 1]$, alors l'estimateur BLUE $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$ de β sans biais du paramètre β défini par :

$$\hat{\beta}_n^{\text{blue}} = \mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}^{-1} \boldsymbol{\eta}, \quad (2.5)$$

où

$$\mathbf{A}_{\mathbf{T}_n} = (a_{rs})_{q \times q},$$

est supposée être inversible et de termes

$$a_{rs} = \sum_{i,j=0}^n f_r(t_{n,i}) R_{\mathbf{T}_n}^{-1}(t_{n,i}, t_{n,j}) f_s(t_{n,j}), \quad r, s = 1, \dots, q$$

et

$$\boldsymbol{\eta} = (\eta_r)_{q \times 1},$$

où

$$\eta_r = \sum_{i,j=0}^n f_r(t_{n,i}) R_{\mathbf{T}_n}^{-1}(t_{n,i}, t_{n,j}) X(t_{n,j}), \quad r = 1, \dots, q$$

et $\mathbf{R}_{\mathbf{T}_n} = (R(t_{n,k}, t_{n,j}))_{(n+1) \times (n+1)}$ est supposée être inversible pour tout n . Comme la matrice $\mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}$ est symétrique et que la matrice de variance-covariance du vecteur aléatoire $\boldsymbol{\eta}$ est $\mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}$, alors la matrice de variance-covariance de $\hat{\beta}_n^{\text{blue}}$ est :

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) &= \mathbb{E} \left((\hat{\beta}_n^{\text{blue}} - \beta)(\hat{\beta}_n^{\text{blue}} - \beta)' \right) \\ &= \mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}^{-1} \text{Var}(\boldsymbol{\eta})(\mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}')^{-1} \\ &= \mathbf{A}_{\mathbf{T}_n}^{-1}. \end{aligned}$$

Définition 2.1.1 Soit ψ une fonction continûment différentiable de l'ensemble des matrices carrées définies positives de dimension q dans \mathbb{R} . Un plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* est dit asymptotiquement ψ -optimal si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{blue}}) \right) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right\} \left\{ \inf_{\mathbf{T}_n} \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) \right) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right\}^{-1} = 1. \quad (2.6)$$

Pour une matrice fixée symétrique \mathbf{M} définie positive, si $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$, où \mathbf{B} une matrice carrée définie positive de dimension q , la condition (2.6) devient

$$\begin{aligned} &\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{blue}}) \mathbf{M} \right) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}) \right\} \\ &\times \left\{ \inf_{\mathbf{T}_n} \text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) \mathbf{M} \right) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}) \right\}^{-1} = 1, \end{aligned} \quad (2.7)$$

où l'infimum est pris parmi tous les plans d'échantillonnages de taille $n+1$.

Sacks et Ylvisaker (1968) ont montré le résultat suivant avec $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$.

Théorème 2.1.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3)_i et (H4)_i, l'estimateur $\hat{\beta}_n^{blue}$, donné par (2.5), satisfait*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\inf_{\mathbf{T}_n} \text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{blue}) \mathbf{M} \right) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}) \right) \\ &= \frac{1}{12} \left(\int_0^1 \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3. \end{aligned}$$

Par ailleurs, un plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} / \int_0^1 \left\{ \alpha(u) \varphi'(u) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/3} du, \quad (2.8)$$

est asymptotiquement ψ -optimal.

Corollaire 2.1.1 *L'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie en (2.8), vérifie*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}) \mathbf{M} \right) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}) \right) \\ &= \frac{1}{12} \left(\int_0^1 \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3. \end{aligned}$$

D'autres critères d'optimalité sont définis dans Sacks et Ylvisaker (1968) mais les résultats asymptotiques obtenus ici peuvent être généralisés à ces critères.

Si $X(t)$ est observé en $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ dans l'intervalle $[0, 1]$, alors on construit l'estimateur simple du vecteur paramètre β par :

$$\hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \mathbf{S}_n^{*-1} \mathbf{L}_{n,q}(X), \quad (2.9)$$

où

$$\mathbf{S}_n^* = (s_{ij}^*)_{q \times q}, \quad (2.10)$$

est supposée être inversible et de termes généraux :

$$s_{ij}^* = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_{n,k+1}) \right), \quad i, j = 1, \dots, q$$

et le vecteur aléatoire

$$\mathbf{L}_{n,q}(X) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi X}{h} \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi X}{h} \right)(t_{n,k+1}) \right). \quad (2.11)$$

Remarque 2.1.1 La matrice \mathbf{S}_n^* n'est pas symétrique et $\mathbf{S}_n^* \rightarrow \mathbf{S}$ lorsque $n \rightarrow \infty$.

Remarque 2.1.2 Les termes généraux $l_{ij}, i, j = 1, \dots, q$ de la matrice de variance-covariance $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X))$ sont

$$l_{ij} = \frac{1}{4n^2} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} \left(K_{i,j}(t_{n,k}, t_{n,l}) + K_{i,j}(t_{n,k}, t_{n,l+1}) + K_{i,j}(t_{n,k+1}, t_{n,l}) + K_{i,j}(t_{n,k+1}, t_{n,l+1}) \right),$$

où la fonction d'autocovariance pondérée $K_{i,j}(t, s)$ est définie par

$$K_{i,j}(t, s) = \left(\frac{\varphi_i}{h}\right)(t)R(t, s)\left(\frac{\varphi_j}{h}\right)(s), \quad i, j = 1, \dots, q, \quad (2.12)$$

et on peut montrer que (voir preuve de la Proposition 2.1.1)

$\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \rightarrow \mathbf{S}$ lorsque $n \rightarrow \infty$.

La matrice de variance-covariance de $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ est définie par :

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) &= \mathbb{E} \left((\hat{\beta}_n^{\text{trap}} - \beta)(\hat{\beta}_n^{\text{trap}} - \beta)' \right) \\ &= \mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^*)^{-1} \\ &= \left(\sum_{k_1=1}^q \sum_{k_2=1}^q d_{ik_1} l_{k_1 k_2} d_{jk_2} \right)_{q \times q} \end{aligned}$$

où $\mathbf{S}_n^{*-1} = (d_{ij})_{q \times q}$.

Les propriétés statistiques, absence de biais et comportement asymptotique de la variance, de l'estimateur simple $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ sont établies par le résultat suivant.

Proposition 2.1.1 L'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ défini par (2.9), vérifie les propriétés suivantes :

(i) $\text{Biais}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) = 0$ pour tout n

(ii) $\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \rightarrow \text{Var}(\hat{\beta}) = \mathbf{S}^{-1}$ quand $n \rightarrow \infty$

où \mathbf{S} est définie en (2.4).

On en déduit que

$$\begin{aligned} \text{EQM}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) &= \mathbb{E} \left((\hat{\beta}_n^{\text{trap}} - \beta)' (\hat{\beta}_n^{\text{trap}} - \beta) \right) \\ &= \text{trace}(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}})) + \|\text{Biais}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}})\|^2 \\ &= \text{trace}(\mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^*)'^{-1}) \\ &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^q d_{ij} l_{jk} d_{ik}. \end{aligned}$$

La vitesse de convergence optimale de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ ainsi que le plan d'échantillonnage optimal sont obtenus à travers le Théorème 2.1.2 ci-dessous. On énonce d'abord les deux importants lemmes suivants.

Lemme 2.1.1 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3)_i, (H4)_i et pour une matrice fixée symétrique \mathbf{M} définie positive, si ψ est la fonction définie par $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$, alors le vecteur aléatoire $\mathbf{L}_{n,q}(X)$ défini en (2.11), vérifie*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \mathbf{S}^{-1} \right) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right) \\ &= \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) v_{ji} dt \\ &+ \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt, \end{aligned}$$

où $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}$ et la fonction d'autocovariance pondérée $K_{i,j}(t, s)$ est définie par (2.12).

Lemme 2.1.2 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3)_i, (H4)_i et pour une matrice fixée symétrique \mathbf{M} définie positive, si ψ est la fonction définie par $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$, alors la matrice déterministe \mathbf{S}_n^* définie en (2.10), vérifie*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\mathbf{S}^{-1}) - \psi(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1}) \right) \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt, \end{aligned}$$

où $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}$ et la fonction d'autocovariance pondérée $K_{i,j}(t, s)$ est définie par (2.12).

Théorème 2.1.2 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3)_i, (H4)_i et pour une matrice fixée symétrique \mathbf{M} définie positive, si ψ est la fonction définie par $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$, alors l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ défini en (2.9), vérifie*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}})) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right) = \frac{1}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t)}{h^2(t)} dt. \quad (2.13)$$

Par ailleurs, le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} / \int_0^1 \left\{ \alpha(u) \varphi'(u) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/3} du, \quad (2.14)$$

est asymptotiquement ψ -optimal.

Corollaire 2.1.2 L'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie en (2.14), vérifie

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}})) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right) = \frac{1}{12} \left(\int_0^1 \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3.$$

D'après le résultat de ce Corollaire, l'estimateur simple $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}$, avec un plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* ψ -optimal, possède exactement la même performance asymptotique que l'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{blue}}$ (voir Corollaire 2.1.1).

En se basant sur des observations de $X(t)$ en $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ dans l'intervalle $[0, 1]$, on construit l'estimateur de l'AUC(g) par :

$$L_n^{\text{trap}}(g) = \mathbf{z}' \hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \mathbf{z}' (\mathbf{S}_n^*)^{-1} \mathbf{L}_{n,q}(X), \quad (2.15)$$

où $\mathbf{z}' = (z_1, \dots, z_q)$ avec $z_i = \int_0^1 f_i(t) dt$, et $f_i(t)$ sont de la forme (2.2), $i = 1, \dots, q$. Cet estimateur est sans biais de AUC(g) et de variance

$$\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) = \mathbf{z}' \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \mathbf{z} = \mathbf{z}' \mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^*)'^{-1} \mathbf{z}.$$

Les propriétés statistiques de l'estimateur simple $L_n^{\text{trap}}(g)$ sont données par la proposition suivante.

Proposition 2.1.2 L'estimateur $L_n^{\text{trap}}(g)$ défini par (2.15), vérifie les propriétés suivantes :

- (i) $\text{Biais}(L_n^{\text{trap}}(g)) = 0$ pour tout n
- (ii) $\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) \rightarrow \text{Var}(L(g)) = \mathbf{z}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{z}$ quand $n \rightarrow \infty$

où \mathbf{S} est définie en (2.4).

Le Théorème 2.1.3 ci-dessous donne la vitesse exacte de convergence optimale de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $L_n^{\text{trap}}(g)$ ainsi que le plan d'échantillonnage optimal. De même, on donne d'abord les deux lemmes suivants qui permettent d'énoncer le Théorème 2.1.3.

Lemme 2.1.3 Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3) _{i} et (H4) _{i} , le vecteur aléatoire $\mathbf{L}_{n,q}(X)$ défini en (2.11), vérifie

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) \\ &= \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) \gamma_{ji} dt \\ &+ \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) \gamma_{ji} dt, \end{aligned}$$

où $\mathbf{A} = \mathbf{z} \mathbf{z}'$ et $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}$.

Lemme 2.1.4 *Sous les hypothèses (H1), (H2), (H3)_i et (H4)_i, la matrice déterministe S_n^* définie en (2.10), vérifie*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left((S - S_n^*) S^{-1} A S^{-1} \right) = -\frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) \gamma_{ji} dt,$$

où $A = z z'$ et $S^{-1} A S^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}$.

Théorème 2.1.3 *Sous les mêmes hypothèses que Théorème 2.1.2, l'estimateur $L_n^{\text{trap}}(g)$ de l'AUC(g) défini en (2.15), vérifie*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \quad (2.16) \\ &= \frac{\text{trace}(M)}{12} \int_0^1 \alpha(t) \frac{\varphi'(t) (S^{-1} A S^{-1}) \varphi(t)}{h^2(t)} dt, \end{aligned}$$

où $A = z z'$.

Par ailleurs, le plan d'échantillonnage T_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (S^{-1} A S^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} / \int_0^1 \left\{ \alpha(u) \varphi'(u) (S^{-1} A S^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/3} du, \quad (2.17)$$

est asymptotiquement ψ -optimal.

De même, on obtient la vitesse exacte de convergence optimale pour l'estimateur de l'AUC(g) à travers le résultat suivant.

Corollaire 2.1.3 *L'estimateur $L_{T_n^*}^{\text{trap}}(g)$, construit à partir de T_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie en (2.17), vérifie*

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_{T_n^*}^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\ &= \frac{\text{trace}(M)}{12} \left(\int_0^1 \left\{ \alpha(t) \varphi'(t) (S^{-1} A S^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3, \end{aligned}$$

où $A = z z'$.

Exemple 2.1.1

On considère le modèle de régression multiple (2.1) avec $q = 2$:

$$X(t) = \beta_1 f_1(t) + \beta_2 f_2(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1]$$

où $f_1(t) = \frac{-t^2}{2} + t$, $f_2(t) = \frac{-t^3}{6} + \frac{t}{2}$ et le processus d'erreur $\varepsilon(t)$ est un Mouvement Brownien avec une fonction d'autocovariance $R(t, s) = \min(t, s)$. Les

CHAPITRE 2 : Plans d'expérience pour le modèle de régression multiple

fonctions de régression $f_1(t), f_2(t)$ peuvent s'écrire sous l'hypothèse $(H3)_i$ avec $\varphi_1(s) = 1, \varphi_2(s) = s$. Il s'ensuit que la fonction de saut est :

$$\alpha(t) = R^{0,1}(t, t-) - R^{0,1}(t, t+) = 1 > 0.$$

On peut vérifier que la matrice \mathbf{S} a pour éléments :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{5}{24} \\ \frac{5}{24} & \frac{2}{15} \end{pmatrix}.$$

La densité optimale est d'après (2.14) avec $\mathbf{M} = \mathbf{I}_q$:

$$h^*(t) = (89t^2 - 112t + 881/25)^{1/3} / 1.7530$$

et les points d'échantillonnage optimaux peuvent être calculés numériquement via un algorithme approprié. On prendra pour simplifier la densité uniforme $h(t) = 1_{[0,1]}(t)$.

Le tableau suivant compare les valeurs des trois variations résiduelles $e_1(n), e_2(n), e_3(n)$ pour plusieurs valeurs de la taille de l'échantillon n où

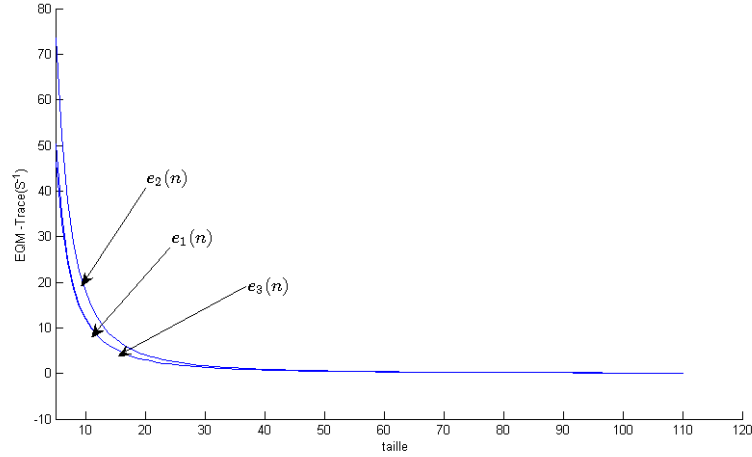
$$\begin{aligned} e_1(n) &= \text{EQM}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1}) \\ e_2(n) &= \text{EQM}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1}) \\ e_3(n) &= \frac{c^*}{n^2} = \frac{1187}{n^2} \end{aligned}$$

et c^* étant la constante asymptotique du Théorème 2.1.2 avec $\mathbf{M} = \mathbf{I}_q$.

n	$e_1(n)$	$e_2(n)$	$e_3(n)$
5	51.6253	75.5432	47.5022
10	12.1190	17.9615	11.8756
15	5.3256	7.5682	5.2780
20	2.9839	4.0723	2.9689
30	1.3225	1.6968	1.3195
50	0.4754	0.5672	0.4750
100	0.1188	0.1315	0.1188
110	0.0982	0.1078	0.0981

TAB. 2.1 – Variations résiduelles $e_i(n), i = 1, 2, 3$ pour différentes valeurs de la taille n de l'échantillon

La figure FIG. 2.1 donne la représentation graphique des deux variations résiduelles correspondant à l'estimateur BLUE, l'estimateur sans biais des trapèzes ainsi que la valeur asymptotique c^*/n^2 . À partir du tableau TAB. 2.1 et la figure FIG. 2.1 on peut voir que les deux courbes correspondantes aux deux variations $e_1(n), e_3(n)$ sont très proches pour des tailles d'échantillon $n \geq 15$ tandis que, les valeurs de $e_2(n)$ pour l'estimateur simple des trapèzes est légèrement plus élevée pour $n \leq 30$. Cependant, pour une grande taille de l'échantillon $n \geq 100$, les performances des deux estimateurs sont très proches et atteignent tous les deux leur valeur asymptotique $e_3(n)$.


 FIG. 2.1 – $(EQM - Trace(S^{-1}))$ en fonction de la taille de l'échantillon

2.2 Distribution asymptotique

On considère N unités expérimentales indépendantes, ayant chacune $n+1$ mesures de la réponse

$$X_j(t_k) = \beta' f(t_k) + \varepsilon_j(t_k) \quad j = 1, \dots, N \text{ et } k = 0, \dots, n.$$

Les processus d'erreur $\{\varepsilon_j, j = 1, \dots, N\}$ sont supposés i.i.d centrés, avec la même fonction d'autocovariance

$$cov(\varepsilon_j(t), \varepsilon_l(s)) = \begin{cases} R(t, s) & \text{si } j = l \\ 0 & \text{si } j \neq l \end{cases}. \quad (2.18)$$

Si chaque fonction aléatoire $X_j(t)$ est observée à $n+1$ points du plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ dans l'intervalle $[0, 1]$, alors on construit l'estimateur simple sans biais du vecteur paramètre β par :

$$\hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \mathbf{S}_n^{*-1} \mathbf{L}_{n,q}(\bar{X}), \quad (2.19)$$

où \mathbf{S}_n^* est définie en (2.10), $\bar{X}(t) = \sum_{j=1}^N X_j(t)/N$

et

$$\mathbf{L}_{n,q}(\bar{X}) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi \bar{X}}{h} \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi \bar{X}}{h} \right)(t_{n,k+1}) \right)$$

où les termes généraux $\bar{l}_{ij}, i, j = 1, \dots, q$ de la matrice de variance-covariance $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(\bar{X}))$ sont

$$\bar{l}_{ij} = \frac{1}{4n^2 N} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} \left(K_{i,j}(t_{n,k}, t_{n,l}) + K_{i,j}(t_{n,k}, t_{n,l+1}) + K_{i,j}(t_{n,k+1}, t_{n,l}) + K_{i,j}(t_{n,k+1}, t_{n,l+1}) \right).$$

Par conséquent, l'estimateur simple sans biais $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ défini par (2.19), est consistant quand le nombre d'unités expérimentales est suffisamment grand.

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \sim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbf{S}^{-1} \longrightarrow O_q \text{ lorsque } N \rightarrow \infty.$$

L'estimateur simple sans biais de l'AUC(g) est de la forme

$$L_n^{\text{trap}}(g) = \mathbf{z}' \hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \mathbf{z}' \mathbf{S}_n^{*-1} \mathbf{L}_{n,q}(\bar{X})$$

et est consistant car sa variance est

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) &= \mathbf{z}' \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \mathbf{z} = \mathbf{z}' \mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(\bar{X})) (\mathbf{S}_n^*)'^{-1} \mathbf{z} \\ &\sim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbf{z}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{z} \longrightarrow 0 \text{ as } N \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Enfin, on peut appliquer le Théorème de la limite centrale pour obtenir la distribution asymptotique de $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ et $L_n^{\text{trap}}(g)$ quand $n, N \rightarrow \infty$.

Théorème 2.2.1 *Si les processus d'erreur $\{\varepsilon_j, j = 1, \dots, N\}$ satisfont (2.18), alors quand $n, N \rightarrow \infty$ on a*

$$\sqrt{N} \left(\hat{\beta}_n^{\text{trap}} - \beta \right) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(\mathbf{0}_q, \mathbf{S}^{-1})$$

et

$$\sqrt{N} \left(L_n^{\text{trap}}(g) - \text{AUC}(g) \right) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \mathbf{z}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{z})$$

où $\mathbf{0}_q$ représente la matrice nulle de taille q et \xrightarrow{d} la convergence en distribution.

On peut déduire les intervalles de confiance de niveau $(1 - \alpha)100\%$ pour les paramètres $\beta_j, j = 1, \dots, q$ et l'AUC(g).

$$IC_\alpha(\beta_j) = \left[\hat{\beta}_j^{\text{trap}} - u_{\alpha/2} N^{-1/2} \sqrt{k_{jj}}, \hat{\beta}_j^{\text{trap}} + u_{\alpha/2} N^{-1/2} \sqrt{k_{jj}} \right]$$

et

$$IC_\alpha(\text{AUC}(g)) = \left[L_n^{\text{trap}}(g) - u_{\alpha/2} N^{-1/2} \sqrt{\mathbf{z}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{z}}, L_n^{\text{trap}}(g) + u_{\alpha/2} N^{-1/2} \sqrt{\mathbf{z}' \mathbf{S}^{-1} \mathbf{z}} \right]$$

où $u_{\alpha/2}$ est le quantile d'ordre $(1 - \alpha/2)$ de la loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$ et $\mathbf{S}^{-1} = (k_{ij})_{q \times q}$.

2.3 Preuves des résultats

2.3.1 Preuve de la Proposition 2.1.1

(i) En utilisant le modèle de régression linéaire $X(t) = \mathbf{f}'(t)\boldsymbol{\beta} + \varepsilon(t)$, l'estimateur $\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{\text{trap}}$ peut être écrit comme

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{\text{trap}} = \mathbf{S}_n^{*-1} \left(L_{n,q}(\mathbf{f}')\boldsymbol{\beta} + L_{n,q}(\varepsilon) \right)$$

et puisque le processus d'erreur est centré, $\mathbb{E}(L_{n,q}(\varepsilon)) = 0$ alors $\mathbb{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{\text{trap}}) = \mathbf{S}_n^{*-1} L_{n,q}(\mathbf{f}')\boldsymbol{\beta} = \mathbf{S}_n^{*-1} \mathbf{S}_n^* \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}$.

(ii) Comme $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{\text{trap}}) = \mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^*)^{-1}$, il suffit de montrer que lorsque $n \rightarrow \infty$, alors

$$\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \longrightarrow \mathbf{S} \quad \text{et} \quad \mathbf{S}_n^* \longrightarrow \mathbf{S}.$$

On rappelle que les termes généraux l_{ij} , $i, j = 1, \dots, q$ de la matrice de covariance $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X))$ sont

$$l_{ij} = \frac{1}{4n^2} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} (K_{i,j}(t_k, t_l) + K_{i,j}(t_k, t_{l+1}) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_l) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_{l+1})),$$

où la fonction d'autocovariance pondérée $K_{i,j}(t, s)$ est définie par (2.12).

En utilisant le Théorème de la moyenne pour l'intégrale de la densité h , on peut écrire pour chaque $i, j = 1, \dots, q$

$$l_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} (K_{i,j}(t_k, t_l) + K_{i,j}(t_k, t_{l+1}) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_l) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_{l+1})) h(\xi_{i,j}^k) h(\eta_{i,j}^l) \times \Delta t_k \Delta t_l.$$

où $t_k < \xi_{i,j}^k < t_{k+1}$ et $t_l < \eta_{i,j}^l < t_{l+1}$ sont des points intermédiaires et l'application d'intégrale de Riemann, quand $n \rightarrow \infty$, donne

$$l_{ij} \longrightarrow \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(t) R(t, s) \varphi_j(s) dt ds = s_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, q$$

et par conséquent, $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \longrightarrow \mathbf{S}$.

De la même manière, pour les termes s_{ij}^* de la matrice \mathbf{S}_n^*

$$\begin{aligned} s_{ij}^* &= \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_k) + \left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_{k+1}) \right), \quad i, j = 1, \dots, q \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_k) + \left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_{k+1}) \right) h(\xi_{i,j}^k) \Delta t_k, \quad i, j = 1, \dots, q, \end{aligned}$$

où $t_k < c_{i,j}^k < t_{k+1}$ est un point intermédiaire.

Il s'ensuit que par l'intégration de Riemann, quand $n \rightarrow \infty$,

$$s_{ij}^* \longrightarrow \int_0^1 \varphi_i(t) f_j(t) dt = \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(t) R(t, s) \varphi_j(s) dt ds = s_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, q,$$

alors $\mathbf{S}_n^* \longrightarrow \mathbf{S}$ et comme $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \longrightarrow \mathbf{S}$, on obtient

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) = \mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} \longrightarrow \mathbf{S}^{-1}.$$

2.3.2 Preuve du Théorème 2.1.2

Preuve du Lemme 2.1.1

On pose

$$\begin{aligned} a_n &= n^2 \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \mathbf{S}^{-1} \right) - \psi \left(\mathbf{S}^{-1} \right) \right) \\ &= n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \right), \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\text{et} \quad \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}, \quad \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} = (E_{ij})_{q \times q}.$$

On écrit a_n sous la forme suivante

$$a_n = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^2 E_{ij}) v_{ji}.$$

Calcul de $\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij}$:

Comme $\mathbf{S} = (s_{ij})_{q \times q}$ et $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) = (l_{ij})_{q \times q}$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} E_{ij} &= l_{ij} - s_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, q \\ &= \frac{1}{4n^2} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} (K_{i,j}(t_k, t_l) + K_{i,j}(t_k, t_{l+1}) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_l) + K_{i,j}(t_{k+1}, t_{l+1})) \\ &\quad - \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(t) R(t, s) \varphi_j(s) dt ds. \end{aligned}$$

En utilisant les mêmes techniques que le lemme 1.4.1, on obtient :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} &= -\frac{1}{12} \int_0^1 (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) dt \quad (2.21) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 (K_{i,j}^{1,0}(t-, t) - K_{i,j}^{1,0}(t+, t)) dt \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) dt \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\frac{K_{i,j}^{1,0}(1, t)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{1,0}(0, t)}{h(0)} \right) h(t) dt, \end{aligned}$$

et par conséquent,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} a_n &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} \right) v_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) v_{ji} dt \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt, \end{aligned}$$

car

$$K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+) = K_{i,j}^{1,0}(t-, t) - K_{i,j}^{1,0}(t+, t),$$

et

$$\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) v_{ji} = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{1,0}(1, t)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{1,0}(0, t)}{h(0)} \right) v_{ji}.$$

Preuve du Lemme 2.1.2

On pose cette fois-ci,

$$\begin{aligned} b_n &= n^2 \left(\psi(\mathbf{S}^{-1}) - \psi(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1}) \right) \\ &= n^2 \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \right), \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\text{et } \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}, \quad \mathbf{S} - \mathbf{S}_n^* = (\lambda_{ij})_{q \times q}.$$

On écrit b_n sous la forme suivante

$$b_n = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^2 \lambda_{ij}) v_{ji}.$$

Calcul de $\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij}$:

Comme $\mathbf{S} = (s_{ij})_{q \times q}$ et $\mathbf{S}_n^* = (s_{ij}^*)_{q \times q}$, on peut aussi écrire :

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} &= s_{ij} - s_{ij}^*, \quad i, j = 1, \dots, q \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \varphi_i(t) R(t, s) \varphi_j(s) dt ds - \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_k) + \left(\frac{\varphi_i}{h} f_j \right)(t_{k+1}) \right). \end{aligned}$$

En utilisant les mêmes techniques que lemme 1.4.2, on obtient :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} &= -\frac{1}{12} \int_0^1 (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) dt \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 (K_{i,j}^{1,0}(t-, t) - K_{i,j}^{1,0}(t+, t)) dt \\ &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\frac{K_{i,j}^{1,0}(1, t)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{1,0}(0, t)}{h(0)} \right) h(t) dt, \end{aligned} \quad (2.23)$$

et par conséquent,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} b_n &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} \right) v_{ji} \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt. \end{aligned}$$

Preuve du Théorème 2.1.2

On rappelle que

$$\begin{aligned} \psi(\text{Var}(\hat{\beta})) &= \text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}) M \right) = \text{trace} \left(S^{-1} M \right), \\ \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) &= \text{trace} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) M \right) \\ &= \text{trace} \left(S_n^{* -1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (S_n^{*'})^{-1} M \right). \end{aligned}$$

En appliquant les propriétés de la trace d'une matrice carrée, on peut écrire et décomposer judicieusement la ψ - variance résiduelle de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi(\text{Var}(\hat{\beta})) &= \text{trace} \left(\left(S_n^{* -1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (S_n^{*'})^{-1} - S^{-1} \right) M \right) \\ &= \text{trace} \left(S_n^{* -1} \left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - S_n^* S^{-1} S_n^{*'} \right) (S_n^{*'})^{-1} M \right) \\ &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - S_n^* S^{-1} S_n^{*'} \right) (S_n^{*'})^{-1} M S_n^{* -1} \right) \\ &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - S \right) (S_n^{*'})^{-1} M S_n^{* -1} \right) \\ &\quad + \text{trace} \left((S - S_n^*) S^{-1} M S_n^{* -1} \right) \\ &\quad + \text{trace} \left((S - S_n^{*'}) (S_n^{*'})^{-1} M S_n^{* -1} \right). \end{aligned}$$

Comme la matrice S est symétrique et $S_n^* \rightarrow S$ on obtient

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi(\text{Var}(\hat{\beta})) \right) &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - S \right) S^{-1} M S^{-1} \right) \\ &\quad + 2 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left((S - S_n^*) S^{-1} M S^{-1} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} (a_n + 2b_n), \end{aligned} \tag{2.24}$$

où a_n et b_n sont définis en (2.20) et (2.22).

D'après les résultats des deux lemmes 2.1.1, 2.1.2 précédents, on déduit que :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} \right) v_{ji}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) v_{ji} dt \\
 &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} b_n &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} \right) v_{ji} \\
 &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) v_{ji} dt.
 \end{aligned}$$

En utilisant (2.24) et en combinant les résultats des deux lemmes 2.1.1, 2.1.2, on obtient le résultat asymptotique suivant :

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi(\text{Var}(\hat{\beta})) \right) &= \lim_{n \rightarrow \infty} (a_n + 2b_n) \\
 &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} \right)(t) \alpha(t) \left(\frac{\varphi_j}{h} \right)(t) \right) dt \right) v_{ji} \\
 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \frac{\alpha(t)}{h^2(t)} \left(\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \varphi_j(t) v_{ji} \varphi_i(t) \right) dt \\
 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \frac{\alpha(t)}{h^2(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt.
 \end{aligned}$$

On montre que le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (2.14), minimise la constante asymptotique. Pour cela, on pose

$$U_{\alpha, v}(h) = \int_0^1 \alpha(t) \frac{v(t)}{h^2(t)} dt,$$

où

$$v(t) = \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t).$$

Par une application directe de l'inégalité de Hölder avec les notations $p = 3, q = \frac{3}{2}$, on a

$$\begin{aligned}
 U_{\alpha, v}(h^*) &= \left(\int_0^1 \{ \alpha(t) v(t) \}^{1/3} dt \right)^3 \\
 &= \left(\int_0^1 \left(\alpha(t) \frac{v(t)}{h^2(t)} \right)^{1/3} h^{2/3}(t) dt \right)^3 \\
 &\leq \left(\int_0^1 \alpha(t) \frac{v(t)}{h^2(t)} dt \right) \left(\int_0^1 h(t) dt \right)^2 \\
 &= U_{\alpha, v}(h),
 \end{aligned}$$

où h désigne une densité positive arbitraire dans l'intervalle $[0, 1]$. Ce qui achève la preuve du Théorème 2.1.2.

Preuve du Corollaire 2.1.2

On remplace en (2.13) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (2.14) pour obtenir le résultat.

2.3.3 Preuve du Théorème 2.1.3

Preuve de la Proposition 2.1.2

La démonstration de cette Proposition est similaire à celle de la Proposition 2.1.1.

Preuve du Lemme 2.1.3

On utilise les notations suivantes :

$$\tau_n = n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right), \quad (2.25)$$

$$\text{et } \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}, \quad \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} = (E_{ij})_{q \times q}.$$

On peut écrire aussi τ_n sous la forme suivante

$$\tau_n = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^2 E_{ij}) \gamma_{ji}.$$

D'après la preuve du Lemme 2.1.1, on a

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (K_{i,j}^{0,1}(t, t-) - K_{i,j}^{0,1}(t, t+)) \gamma_{ji} dt \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) \gamma_{ji} dt. \end{aligned}$$

Preuve du Lemme 2.1.4

On pose

$$\theta_n = n^2 \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right), \quad (2.26)$$

$$\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}, \quad \mathbf{S} - \mathbf{S}_n^* = (\lambda_{ij})_{q \times q}.$$

On peut écrire θ_n sous la forme suivante

$$\theta_n = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^2 \lambda_{ij}) \gamma_{ji}.$$

De même, d'après la preuve du Lemme 2.1.2, on a

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \theta_n &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= -\frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 1)}{h(1)} - \frac{K_{i,j}^{0,1}(t, 0)}{h(0)} \right) h(t) \gamma_{ji} dt. \end{aligned}$$

Preuve du Théorème 2.1.3

On rappelle que

$$\begin{aligned} \text{EQM}(L(g)) &= \text{Var}(L(g)) = \mathbf{z}' \text{Var}(\hat{\beta}) \mathbf{z}, \\ \text{EQM}(L_n^{\text{trap}}(g)) &= \text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) = \mathbf{z}' \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \mathbf{z}, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \psi(\text{Var}(L(g))) &= \text{trace}(\text{Var}(L(g))\mathbf{M}) = \text{Var}(L(g)) \text{trace}(\mathbf{M}), \\ \psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) &= \text{trace}(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))\mathbf{M}) = \text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) \text{trace}(\mathbf{M}), \end{aligned}$$

où $\mathbf{z}' = (z_1, \dots, z_q)$; $z_i = \int_0^1 f_i(t) dt$, et $f_i(t)$ sont données par (2.2).

On peut écrire alors :

$$\begin{aligned} \psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) &= \left(\mathbf{z}' \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right) \mathbf{z} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\mathbf{z}' \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right) \mathbf{z} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right) \mathbf{z} \mathbf{z}' \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) \right) \mathbf{A} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\left(\mathbf{S}_n^{*-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} - \mathbf{S}^{-1} \right) \mathbf{A} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\mathbf{S}_n^{*-1} \left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^{*'} \right) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} \mathbf{A} \right) \\ &\quad \times \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^{*'} \right) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}_n^{*-1} \right) \\ &\quad \times \text{trace}(\mathbf{M}), \end{aligned}$$

où $\mathbf{A} = \mathbf{z} \mathbf{z}'$ est une matrice symétrique.

On peut aussi décomposer cette ψ -variance résiduelle de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) &= \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}_n^{*-1} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &\quad + \text{trace} \left(\left(\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^* \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}_n^{*-1} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\ &\quad + \text{trace} \left(\left(\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^{*'} \right) (\mathbf{S}_n^{*'})^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}_n^{*-1} \right) \text{trace}(\mathbf{M}). \end{aligned}$$

Comme la matrice $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}$ est symétrique et $\mathbf{S}_n^* \rightarrow \mathbf{S}$, on obtient

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\
 = & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\
 + & 2 \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) \text{trace}(\mathbf{M}) \\
 = & \text{trace}(\mathbf{M}) \lim_{n \rightarrow \infty} (\tau_n + 2\theta_n), \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

où τ_n et θ_n sont définis en (2.25) et (2.26).

En utilisant la formule (2.27) et en combinant les résultats des deux lemmes 2.1.3, 2.1.4, on obtient

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\
 = & \text{trace}(\mathbf{M}) \lim_{n \rightarrow \infty} (\tau_n + 2\theta_n) \\
 = & \text{trace}(\mathbf{M}) \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left(\frac{\varphi_i}{h} \right)(t) \alpha(t) \left(\frac{\varphi_j}{h} \right)(t) \right) dt \right) \gamma_{ji} \\
 = & \frac{\text{trace}(\mathbf{M})}{12} \int_0^1 \frac{\alpha(t)}{h^2(t)} \left(\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \varphi_j(t) \gamma_{ji} \varphi_i(t) \right) dt \\
 = & \frac{\text{trace}(\mathbf{M})}{12} \int_0^1 \frac{\alpha(t)}{h^2(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt.
 \end{aligned}$$

En procédant de la même manière que le Théorème 2.1.2 avec $v(t) = \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t)$, on montre que la constante asymptotique est minimisée en prenant un plan d'échantillonnage engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (2.17).

Preuve du Corollaire 2.1.3

On remplace en (2.16) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (2.17) pour obtenir le résultat.

Chapitre 3

Extensions aux processus stationnaires de Hölder

3.1 Processus de Hölder

Le processus stationnaire $\varepsilon(t)$ appartient à la classe de Hölder d'indice α et dont la fonction d'autocovariance $R(t, s) = R(t - s)$ peut se développer autour de 0 de la façon suivante pour $0 < \alpha < 2$:

$$R(t - s) = R(0) - \frac{1}{2}\lambda_\alpha |t - s|^\alpha + o(|t - s|^\alpha) \quad (3.1)$$

avec

$$\lambda_\alpha = R^{(\alpha)}(0-) - R^{(\alpha)}(0+) = 2R^{(\alpha)}(0-) = -2R^{(\alpha)}(0+) = \text{constante positive}$$

où $R^{(\alpha)}(0\pm)$ sont les dérivées fractionnaires d'ordre α de R à droite et à gauche de 0 :

$$\begin{aligned} R^{(\alpha)}(0+) &= \lim_{\tau \rightarrow 0+} \frac{R(\tau) - R(0)}{\tau^\alpha} \\ R^{(\alpha)}(0-) &= \lim_{\tau \rightarrow 0-} \frac{R(0) - R(\tau)}{(-\tau)^\alpha}. \end{aligned}$$

Remarque 3.1.1 Si $\alpha = 1$, on retrouve les hypothèses (H1) et (H2) du Chapitre 1 pour un processus stationnaire avec $\lambda_1 = R^{(1)}(0-) - R^{(1)}(0+) = \lambda_1 = \text{constante positive}$.

Les processus de Hölder de type (3.1) ont été considérés par Benhenni (1998) pour le problème de l'estimation d'intégrales de processus stochastiques, par Seleznev (2000) pour l'approximation de processus stochastiques. Iatas et Lang (1997), Blanke et Vial (2008, 2012) se sont intéressés, en particulier, à l'estimation du paramètre indice α en se basant sur la méthode des variations quadratiques, et par Hamonier (2012) en se basant sur la méthode des ondelettes. On pourra aussi consulter le livre de Ritter (2000) qui donne une vue générale de la littérature consacrée à ces problèmes.

Exemple 3.1.1

1. Considérons le processus d'erreur dont la fonction d'autocovariance stationnaire est :

$$R(t, s) = 1 - \beta|t - s|^\alpha$$

où $0 < \alpha < 2$ et $\beta > 0$. Alors, les dérivées fractionnaires d'ordre $0 < \alpha < 2$ à gauche et à droite de 0 de la fonction d'autocovariance sont :

$$R^{(\alpha)}(0+) = -\beta \text{ et } R^{(\alpha)}(0-) = \beta.$$

Il s'ensuit que la fonction de saut fractionnaire est :

$$\lambda_\alpha = R^{(\alpha)}(0-) - R^{(\alpha)}(0+) = 2\beta > 0.$$

2. Considérons le processus d'erreur dont la fonction d'autocovariance stationnaire est :

$$R(t, s) = e^{-\beta|t-s|^\alpha}$$

où $0 < \alpha < 2$ et $\beta > 0$. Alors, les dérivées fractionnaires d'ordre $0 < \alpha < 2$ sont $R^{(\alpha)}(0+) = -\beta$ et $R^{(\alpha)}(0-) = \beta$.

Il s'ensuit que la fonction de saut fractionnaire est :

$$\lambda_\alpha = R^{(\alpha)}(0-) - R^{(\alpha)}(0+) = 2\beta > 0.$$

Pour la suite de ce chapitre, on définit le paramètre γ_α suivant :

$$\gamma_\alpha = \begin{cases} \lambda_1 & \text{si } \alpha = 1 \\ 0 & \text{si } 1 < \alpha < 2 \end{cases}. \quad (3.2)$$

3.2 Modèle de régression simple

On considère le modèle de régression simple (1.5) avec la fonction de régression $f(t)$ donnée par (1.4). On rappelle que l'estimateur BLUE $\hat{\beta}$ de β sur $[0, 1]$ défini en (1.6) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\hat{\beta} = \frac{I(X)}{I(f)},$$

où

$$I(X) = \int_0^1 X(t)\varphi(t) dt,$$

$$I(f) = \int_0^1 f(t)\varphi(t) dt.$$

De même, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) sur $[0, 1]$ est défini par $L(g) = z_1 \hat{\beta}$ où $\text{Var}(L(g)) = z_1^2 s^{-2}$ avec $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$.

Par ailleurs, l'estimateur simple sans biais de β construit à partir de $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ engendré par une densité positive $h(t)$, définie selon (1.1), est donné par (1.16) du chapitre 1 :

$$\hat{\beta}_n^{\text{trap}} = \frac{L_n(X)}{L_n(f)},$$

où

$$L_n(X) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} X \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} X \right)(t_{n,k+1}) \right), \quad (3.3)$$

$$L_n(f) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\varphi}{h} f \right)(t_{n,k+1}) \right). \quad (3.4)$$

L'estimateur simple de l'AUC(g) est défini par $L_n^{\text{trap}}(g) = z_1 \hat{\beta}_n^{\text{trap}}$.

On utilise aussi la décomposition suivante de la variation résiduelle entre l'estimateur empirique $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ et l'estimateur continu $\hat{\beta}$:

$$\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}) = \left(\frac{\text{Var}(L_n(X)) - s^2}{L_n^2(f)} \right) + \frac{\left(I(f) - L_n(f) \right) \left(I(f) + L_n(f) \right)}{L_n^2(f) I(f)}. \quad (3.5)$$

La vitesse de convergence optimale de la variance de l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ ainsi que le plan d'échantillonnage optimal dépendent de l'indice α et sont obtenus à travers le Théorème 3.2.1 ci-dessous. Pour cela, les deux lemmes suivants sont nécessaires car ils donnent le comportement asymptotique des deux composantes en (3.5).

Lemme 3.2.1 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3) et (H4) sont vérifiées, alors l'estimateur $L_n(X)$, défini en (3.3) avec un plan d'échantillonnage régulier engendré par une densité h , satisfait*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(L_n(X)) - s^2 \right) = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.6)$$

où ζ est la fonction zêta de Riemann.

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_n(X)) - s^2 \right) \quad (3.7) \\ &= -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \\ & \quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{6} \int_0^1 \left[R(t) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt$$

$$+\frac{1}{6} \int_0^1 (uh)(t) dt \left(\left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0).$$

Remarque 3.2.1 La fonction ζ de Riemann est une fonction analytique complexe méromorphe définie, pour tout nombre complexe s tel que $Re(s) > 1$, par la série de Riemann :

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{4^s} + \dots$$

avec les propriétés suivantes :

1. Valeurs de la fonction zêta pour s entier supérieur à 1 :

$$\zeta(2k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2k}} = \frac{|B_{2k}|(2\pi)^{2k}}{2(2k)!},$$

valable pour tout entier positif k , où les B_{2k} sont les nombres de Bernoulli. On a des séries infinies convergentes de somme exprimée à l'aide des puissances paires de π :

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}; \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}; \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945}; \zeta(8) = \frac{\pi^8}{9450}; \dots$$

2. Valeurs de la fonction zêta pour s entier négatif :
pour tout entier nature n , $\zeta(-n)$ est le rationnel suivant :

$$\zeta(-n) = (-1)^n \frac{B_{n+1}}{n+1},$$

où B_{n+1} est un nombre de Bernoulli.

Si n est impair, $n = 2k - 1$, avec $k > 0$:

$$\zeta(-(2k-1)) = -\frac{B_{2k}}{2k}.$$

Par exemple :

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}; \zeta(-1) = -\frac{1}{12}; \zeta(-3) = \frac{1}{120}; \zeta(-5) = -\frac{1}{252}; \zeta(-7) = \frac{1}{240}.$$

Si n est pair mais non nul, $n = 2k$ avec $k > 0$:

$$\zeta(-(2k)) = \frac{B_{2k+1}}{2k+1} = 0.$$

Pour plus d'informations sur la fonction zêta de Riemann, voir par exemple le livre de Berndt et Joshi (1983).

Lemme 3.2.2 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3) et (H4) sont vérifiées, alors l'estimateur $L_n(f)$, défini en (3.4) avec un plan d'échantillonnage régulier engendré par une densité h , satisfait*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(I(f) - L_n(f) \right) = 0. \quad (3.8)$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(I(f) - L_n(f) \right) \quad (3.9) \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \\ & \quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt \\ & \quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \left[R(t) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt \\ & \quad - \frac{1}{12} \int_0^1 (uh)(t) dt \left(\left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0). \end{aligned}$$

Théorème 3.2.1 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3) et (H4) sont vérifiées, alors l'estimateur $\hat{\beta}_n^{trap}$ donné par (1.16), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{trap}) - s^{-2} \right) = -\zeta(-\alpha) \frac{\lambda_\alpha}{s^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.10)$$

et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est

$$h^*(t) = \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) / \int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(u) du. \quad (3.11)$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{trap}) - s^{-2} \right) = \frac{1}{12s^4} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt. \quad (3.12)$$

Pour $\alpha = 1$, le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré, par la densité définie par

$$h^*(t) = \varphi^{2/3}(t) / \int_0^1 \varphi^{2/3}(u) du, \quad (3.13)$$

est asymptotiquement optimal.

Corollaire 3.2.1 *L'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou par (3.13) pour $\alpha = 1$, vérifie*

1. *Lorsque $0 < \alpha < 1$,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}) - s^{-2} \right) = -\zeta(-\alpha) \frac{\lambda_\alpha}{s^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) dt \right)^{(\alpha+2)}.$$

2. *Lorsque $\alpha = 1$,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}) - s^{-2} \right) = \frac{1}{12s^4} \lambda_1 \left(\int_0^1 \varphi^{2/3}(t) dt \right)^3.$$

Remarque 3.2.2 *Pour le cas $1 < \alpha < 2$, la vitesse de convergence optimale de la variance de l'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}$ est plus rapide que $\frac{1}{n^2}$, donc il faudrait utiliser un autre estimateur plus approprié ajusté aux bords de l'intervalle $[0, 1]$ pour trouver la vitesse exacte. De plus, comme la constante asymptotique est nulle, tout plan d'échantillonnage régulier est asymptotiquement optimal, en particulier l'échantillonnage périodique.*

Remarque 3.2.3 *Pour un processus d'erreur Höldérien d'indice $0 < \alpha < 1$, la performance asymptotique de l'estimateur $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$ avec le plan d'échantillonnage optimal $\mathbf{T}_n^* = \mathbf{T}_n(h^*)$ est inconnue. Néanmoins, nous pensons que le résultat asymptotique du Corollaire 3.2.1 reste vrai pour l'estimateur BLUE $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$. On peut déjà déduire de ce résultat une borne supérieure du comportement asymptotique de $\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}$ muni du plan d'échantillonnage optimal $\mathbf{T}_n^* = \mathbf{T}_n(h^*)$:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{\mathbf{T}_n^*}^{blue}) - s^{-2} \right) \leq -\zeta(-\alpha) \frac{\lambda_\alpha}{s^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) dt \right)^{(\alpha+2)}.$$

Le comportement asymptotique de l'estimateur de l'AUC(g) muni du plan d'échantillonnage optimal $\mathbf{T}_n^* = \mathbf{T}_n(h^*)$ est établi par les deux Corollaires suivants.

Corollaire 3.2.2 *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 3.2.1, on obtient*

1. *Lorsque $0 < \alpha < 1$,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(L_n^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = -\lambda_\alpha \zeta(-\alpha) \frac{z^2}{s^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.14)$$

$$\text{où } z = \int_0^1 f(t) dt \text{ et } s^2 = \int_0^1 f(t)\varphi(t) dt.$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{1}{12} \gamma_\alpha \frac{z^2}{s^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt. \quad (3.15)$$

Corollaire 3.2.3 L'estimateur $L_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou (3.13) pour $\alpha = 1$, vérifie

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = -\lambda_\alpha \zeta(-\alpha) \frac{z^2}{s^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) dt \right)^{(\alpha+2)}.$$

2. Lorsque $\alpha = 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = \frac{1}{12} \lambda_1 \frac{z^2}{s^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/3}(t) dt \right)^3.$$

3.3 Forme générale de la fonction de régression

On considère le processus d'erreur Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et le modèle de régression linéaire simple (1.5) avec la fonction de régression $f(t)$ donnée sous l'hypothèse (H5). On rappelle que l'estimateur BLUE $\hat{\beta}_a$ de β sur $[0, 1]$ défini en (1.27) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\hat{\beta}_a = \frac{I_a(X)}{I_a(f)},$$

où

$$\begin{aligned} I_a(X) &= I(X) + \sum_{l=1}^L b_l X(a_l), \\ I_a(f) &= I(f) + \sum_{j=1}^L b_j f(a_j) = s_L^2, \end{aligned}$$

et $I(X), I(f)$ sont définis respectivement en (1.14) et (1.15). De même, l'estimateur BLUE de l'AUC(g) est défini par $L_a(g) = z_1 \hat{\beta}_a$ où $\text{Var}(L_a(g)) = z_1^2 s_L^{-2}$ avec $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$.

Par ailleurs, l'estimateur linéaire ajusté simple sans biais de β construit à partir de $n + 1$ points d'un plan d'échantillonnage régulier $\mathbf{T}_n = \{t_{n,k}\}_0^n$ engendré par une densité positive $h(t)$, définie selon (1.1), est donné par (1.29) du Chapitre 1 :

$$\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}} = \frac{L_{a,n}(X)}{L_{a,n}(f)}, \quad (3.16)$$

où

$$L_{a,n}(X) = L_n(X) + \sum_{l=1}^L b_l X(a_l),$$

$$L_{a,n}(f) = L_n(f) + \sum_{j=1}^L b_j f(a_j),$$

et $L_n(X)$, $L_n(f)$ sont définis respectivement en (1.17) et (1.18). L'estimateur simple de l'AUC(g) est défini par $L_{a,n}^{\text{trap}}(g) = z_1 \hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$.

La vitesse de convergence optimale de la variance de l'estimateur $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$ ainsi que la densité optimale sont obtenus à travers le Théorème 3.3.1 ci-dessous.

Théorème 3.3.1 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H4) et (H5) sont vérifiées, alors l'estimateur $\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}$ donné par (3.16), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - s_L^{-2} \right) = -\zeta(-\alpha) \frac{\lambda_\alpha}{s_L^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.17)$$

et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est $h^*(t)$ définie par (3.11).

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - s_L^{-2} \right) = \frac{1}{12s_L^4} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \quad (3.18)$$

$$+ \frac{s_L^{-4}}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1-a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - R(a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right. \\ \left. + R^{(1)}(1-a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (1) + R^{(1)}(a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (0) \right\},$$

avec $a_l \neq 0$ ou $1 \quad \forall l = 1, \dots, L$ quand $\alpha = 1$.

Pour $\alpha = 1$, la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est $h^*(t)$ définie par (3.13).

Remarque 3.3.1 *Lorsque $1 < \alpha < 2$, la vitesse de convergence est d'ordre n^{-2} et la constante asymptotique dépend seulement de la densité aux extrémités de l'intervalle $[0, 1]$. On pourrait choisir dans ce cas une densité régulière h^* qui annule la constante asymptotique en posant des contraintes sur les valeurs de h^* aux bords de l'intervalle $[0, 1]$.*

On en déduit de ce Théorème la vitesse de convergence de la variance de l'estimateur de l'AUC, $L_{a,n}^{\text{trap}}(g)$ à travers le Corollaire suivant.

Corollaire 3.3.1 *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 3.3.1, on obtient*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(L_{a,n}^{\text{trap}}(g)) - \text{Var}(L_a(g)) \right) = -\lambda_\alpha \zeta(-\alpha) \frac{z_1^2}{s_L^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.19)$$

où $z_1 = \int_0^1 f(t) dt$ et s_L^2 défini en (1.28).

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{a,n}^{\text{trap}}(g)) - \text{Var}(L_a(g)) \right) \quad (3.20) \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \frac{z_1^2}{s_L^4} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^2(t)} dt \\ &+ \frac{s_L^{-4} z_1^2}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1-a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - R(a_l) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right. \\ &\quad \left. + R^{(1)}(1-a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (1) + R^{(1)}(a_l) \left(\frac{u}{h} \right) (0) \right\}, \end{aligned}$$

avec $a_l \neq 0$ ou $1 \quad \forall l = 1, \dots, L$ quand $\alpha = 1$.

Pour $\alpha = 1$, la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est $h^*(t)$ définie par (3.13).

On donne aussi les résultats importants suivants pour l'estimateur de régression $\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}$ et l'estimateur $L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}(g)$ de l'AUC(g) muni du plan d'échantillonnage $\mathbf{T}_n^* = \mathbf{T}_n(h^*)$ engendré par la densité optimale h^* définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou (3.13) pour $\alpha = 1$.

Corollaire 3.3.2 *L'estimateur $\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou par (3.13) pour $\alpha = 1$, vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}) - s_L^{-2} \right) = -\zeta(-\alpha) \frac{\lambda_\alpha}{s_L^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) dt \right)^{(\alpha+2)}.$$

2. Lorsque $\alpha = 1$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(\hat{\beta}_{a, \mathbf{T}_n^*}^{\text{trap}}) - s_L^{-2} \right) = \frac{1}{12 s_L^4} \lambda_1 \left(\int_0^1 \varphi^{2/3}(t) dt \right)^3 \\ &+ \frac{s_L^{-4}}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1-a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)} (1) - R(a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)} (0) \right. \\ &\quad \left. + R^{(1)}(1-a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right) (1) + R^{(1)}(a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right) (0) \right\}. \end{aligned}$$

Corollaire 3.3.3 L'estimateur $L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou (3.13) pour $\alpha = 1$, vérifie

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\text{Var}(L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) = -\lambda_\alpha \zeta(-\alpha) \frac{z_1^2}{s_L^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) dt \right)^{(\alpha+2)}.$$

2. Lorsque $\alpha = 1$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\text{Var}(L_{a, \mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) - \text{Var}(L(g)) \right) &= \frac{1}{12} \lambda_1 \frac{z_1^2}{s_L^4} \left(\int_0^1 \varphi^{2/3}(t) dt \right)^3 \\ &+ \frac{s_L^{-4} z_1^2}{6} \sum_{l=1}^L b_l \left\{ R(1-a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(1) - R(a_l) \frac{1}{h^*} \left(\frac{\varphi}{h^*} \right)^{(1)}(0) \right. \\ &\left. + R^{(1)}(1-a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(1) + R^{(1)}(a_l) \left(\frac{\varphi}{h^{*2}} \right)(0) \right\}, \end{aligned}$$

avec $a_l \neq 0$ ou $1 \quad \forall l = 1, \dots, L$.

3.4 Exemple

On considère le modèle de régression simple

$$X(t) = \beta f(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, 1]$$

où $f(t) = w(t) + w(1-t)$ avec $w(t) = 1 - \sqrt{t}e^{-\sqrt{t}}$ et $\varepsilon(t)$ est un processus d'erreur dont la fonction d'autocovariance $R(t, s) = e^{-|t-s|^\alpha}$ avec $\alpha = 1/2$. On montre que $f(t)$ peut s'écrire sous la forme générale de l'hypothèse (H5) du Chapitre 1 avec

$$\varphi(s) = 1/2, \quad L = 2, \quad a_1 = 0, \quad a_2 = 1, \quad b_1 = 1, \quad b_2 = 1.$$

En effet,

$$\begin{aligned} \int_0^1 R(t, s) \varphi(s) ds &= \int_0^t R(t, s) \varphi(s) ds + \int_t^1 R(t, s) \varphi(s) ds \\ &= \int_0^t e^{-(t-s)^{1/2}} (1/2) ds + \int_t^1 e^{-(s-t)^{1/2}} (1/2) ds \\ &= \left(1 - \sqrt{t}e^{-\sqrt{t}} - e^{-\sqrt{t}} \right) + \left(1 - \sqrt{1-t}e^{-\sqrt{1-t}} - e^{-\sqrt{1-t}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{L=2} b_l R(t, a_l) &= b_1 R(t, a_1) + b_2 R(t, a_2) \\ &= e^{-\sqrt{t}} + e^{-\sqrt{1-t}}. \end{aligned}$$

Il s'ensuit que l'hypothèse (H5) est vérifiée car

$$\int_0^1 R(t, s)\varphi(s) ds + \sum_{l=1}^{L=2} b_l R(t, a_l) = w(t) + w(1-t) = f(t).$$

Les dérivées fractionnaires à droite et à gauche de 0 sont $R^{(1/2)}(0+) = -1$ et $R^{(1/2)}(0-) = 1$ et la fonction de saut fractionnaire est :

$\lambda_{1/2} = R^{(1/2)}(0-) - R^{(1/2)}(0+) = 2 > 0$. On peut vérifier aussi que $s_L^2 = 8e^{-1} + 1$. Il est facile de vérifier que la densité du plan d'échantillonnage (asymptotiquement) optimal $h^*(t)$ définie selon (3.11) est $h^*(t) = 1$ et les points optimaux sont $t_{n,k}^* = (k/n)$, $k = 0, \dots, n$.

La figure FIG.3.1 donne la représentation graphique des deux erreurs résiduelles correspondants à l'estimateur BLUE, l'estimateur sans biais des trapèzes et la valeur asymptotique $c^*/n^{3/2} = 0.0067/n^{3/2}$. À partir de la figure FIG.3.1 on peut voir que les trois courbes correspondantes aux $\hat{\beta}_{T_n^*}^{blue}$, $\hat{\beta}_{a, T_n^*}^{trap}$, $c^*/n^{3/2}$ sont très proches pour des tailles d'échantillon $n \geq 10$. Cependant pour une petite taille d'échantillon $n \leq 10$, la performance asymptotique de l'estimateur $\hat{\beta}_{T_n^*}^{blue}$ est meilleure, mais la différence n'est pas significative.

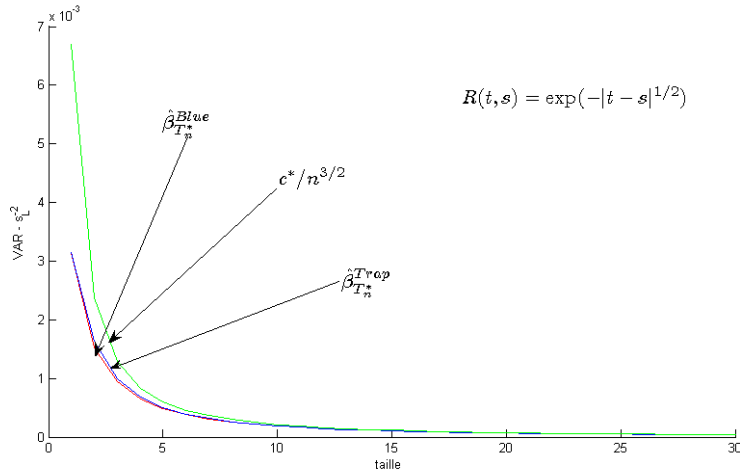


FIG. 3.1 – $(\text{VAR} - s_L^{-2})$ contre la taille de l'échantillon

3.5 Plans d'échantillonnage optimaux selon le critère du Minimax

Le plan d'échantillonnage asymptotiquement optimal T_n^* engendré par la densité optimale

$$h^*(t) = \varphi^{2/(\alpha+2)}(t) / \int_0^1 \varphi^{2/(\alpha+2)}(u) du,$$

peut ne pas être robuste par rapport à une mauvaise spécification de la fonction φ . De même, on utilise le critère du minimax pour la détermination du plan d'échantillonnage optimal et d'appeler une densité d'échantillonnage h^* optimale selon le critère du Minimax pour l'estimation de β ou de l'AUC(g) si elle minimise

$$\max \{ \Psi_\varphi(h) \mid \varphi \in \Lambda_1 \}, \quad (3.21)$$

où pour $0 < \alpha \leq 1$,

$$\Psi_\varphi(h) = \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.22)$$

et Λ_1 est une classe appropriée des fonctions définie par :

$$\Lambda_1 = \left\{ \varphi \in C[0, 1] \text{ tel que } \int_0^1 \varphi(t) dt \leq \sqrt{\epsilon} \right\}. \quad (3.23)$$

Théorème 3.5.1 *Soit Λ_1 défini par (3.23) alors le plan d'échantillonnage régulier T_n^* engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) pour $0 < \alpha < 1$ ou par (3.13) pour $\alpha = 1$, est optimal selon le critère du minimax (3.21).*

3.6 Modèle de régression multiple

On considère le modèle de régression multiple (2.1) où le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et les estimateurs empiriques sans biais de β et l'AUC(g) sont définis respectivement par (2.9), (2.15). La vitesse de convergence optimale de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $\hat{\beta}_n^{\text{trap}}$ ainsi que le plan d'échantillonnage optimal sont obtenus à travers le Théorème 3.6.1 ci-dessous déduit par les deux lemmes suivants. On utilise ici la fonction d'optimalité ψ définie au Chapitre 2 par $\psi(\mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{B}\mathbf{M})$ pour une matrice fixée symétrique \mathbf{M} définie positive de dimension q et \mathbf{B} une matrice carrée définie positive de dimension q .

Lemme 3.6.1 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3)_i et (H4)_i sont vérifiées, alors le vecteur aléatoire $L_{n,q}(X)$ défini en (2.11), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \mathbf{S}^{-1} \right) - \psi \left(\mathbf{S}^{-1} \right) \right) = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) v_{ji} dt,$$

où $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}$.

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \mathbf{S}^{-1} \right) - \psi \left(\mathbf{S}^{-1} \right) \right) = & -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u_i}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u_i}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) v_{ji} dt \\ & - \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R(t) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) v_{ji} dt \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (u_j h)(t) \left(\left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0) v_{ji} dt, \end{aligned}$$

avec $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}$.

Lemme 3.6.2 Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3)_i et (H4)_i sont vérifiées, alors la matrice déterminante \mathbf{S}_n^* défini en (2.10), vérifie

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \right) - \psi \left(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1} \right) \right) = 0.$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \right) - \psi \left(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1} \right) \right) = & \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt \\ & - \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u_i}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u_i}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) v_{ji} dt \\ & + \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R(t) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) v_{ji} dt \\ & - \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (u_j h)(t) \left(\left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0) v_{ji} dt, \end{aligned}$$

où $S^{-1}MS^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}$.

Théorème 3.6.1 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3)_i et (H4)_i sont vérifiées, alors l'estimateur $\hat{\beta}_n^{trap}$ défini en (2.9), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{trap})) - \psi(S^{-1}) \right) = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt, \quad (3.24)$$

et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est

$$h^*(t) = \left\{ \varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/(\alpha+2)} / \int_0^1 \left\{ \varphi'(u) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/(\alpha+2)} du. \quad (3.25)$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{trap})) - \psi(S^{-1}) \right) = \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t)}{h^2(t)} dt. \quad (3.26)$$

Par ailleurs, pour $\alpha = 1$ le plan d'échantillonnage T_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \left\{ \varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} / \int_0^1 \left\{ \varphi'(u) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/3} du, \quad (3.27)$$

est asymptotiquement ψ -optimal.

Corollaire 3.6.1 *L'estimateur $\hat{\beta}_{T_n^*}^{trap}$, construit à partir de T_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.25) pour $0 < \alpha < 1$ ou par (3.27) pour $\alpha = 1$, vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_{T_n^*}^{trap})) - \psi(S^{-1}) \right) = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \left(\int_0^1 \left\{ \varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/(\alpha+2)} dt \right)^{\alpha+2}.$$

2. Lorsque $\alpha = 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(\hat{\beta}_{T_n^*}^{trap})) - \psi(S^{-1}) \right) = \frac{1}{12} \lambda_1 \left(\int_0^1 \left\{ \varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3.$$

La vitesse exacte de convergence optimale de l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur $L_n^{\text{trap}}(g)$ de l'AUC(g) ainsi que le plan d'échantillonnage engendré par la densité optimale définie par (3.25) pour $0 < \alpha < 1$ et (3.27) pour $\alpha = 1$ sont obtenus à travers le Théorème 3.6.2 ci-dessous qui suit les deux lemmes suivants.

Lemme 3.6.3 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3)_i et (H4)_i sont vérifiées, alors le vecteur aléatoire $L_{n,q}(X)$ défini en (2.11), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) \gamma_{ji} dt,$$

où $A = \mathbf{z} \mathbf{z}'$ et $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}$.

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) = \\ & -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) \gamma_{ji} dt \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u_i}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u_i}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) \gamma_{ji} dt \\ & - \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R(t) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) \gamma_{ji} dt \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (u_j h)(t) \left(\left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0) \gamma_{ji} dt, \end{aligned}$$

avec $A = \mathbf{z} \mathbf{z}'$, $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}$.

Lemme 3.6.4 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses (H1), (H3)_i et (H4)_i sont vérifiées, alors la matrice déterministe \mathbf{S}_n^* définie en (2.10), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) = 0.$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right) =$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) \gamma_{ji} dt \\
 & - \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u_i}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u_i}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(t) \right) \gamma_{ji} dt \\
 & + \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\left[R(t) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(s) \right) \gamma_{ji} dt \\
 & - \frac{1}{12} \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (u_j h)(t) \left(\left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0) \gamma_{ji} dt.
 \end{aligned}$$

Théorème 3.6.2 *Si le processus d'erreur est Höldérien d'indice $0 < \alpha < 2$ et si les hypothèses $(H1)$, $(H3)_i$ et $(H4)_i$ sont vérifiées, alors l'estimateur $L_n^{trap}(g)$ de l'AUC(g) défini en (2.15), vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi(\text{Var}(L_n^{trap}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \quad (3.28) \\
 & = -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \text{trace}(\mathbf{M}) \int_0^1 \frac{\varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt,
 \end{aligned}$$

et la densité optimale qui minimise la constante asymptotique est

$$h^*(t) = \left\{ \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/(\alpha+2)} / \int_0^1 \left\{ \varphi'(u) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/(\alpha+2)} du. \quad (3.29)$$

2. Lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_n^{trap}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \quad (3.30) \\
 & = \frac{\text{trace}(\mathbf{M})}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t)}{h^2(t)} dt,
 \end{aligned}$$

où $A = \mathbf{z} \mathbf{z}'$. Par ailleurs, pour $\alpha = 1$ le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* engendré par la densité

$$h^*(t) = \left\{ \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} / \int_0^1 \left\{ \varphi'(u) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(u) \right\}^{1/3} du, \quad (3.31)$$

est asymptotiquement ψ -optimal.

De même, on obtient la vitesse exacte de convergence optimale pour l'estimateur de l'AUC(g) à travers le résultat suivant.

Corollaire 3.6.2 *L'estimateur $L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)$, construit à partir de \mathbf{T}_n^* et engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.29) pour $0 < \alpha < 1$ ou par (3.31) pour $\alpha = 1$, vérifie*

1. Lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) \right) - \psi \left(\text{Var}(L(g)) \right) \right) \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \text{trace}(\mathbf{M}) \left(\int_0^1 \left\{ \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/(\alpha+2)} dt \right)^{\alpha+2}. \end{aligned}$$

2. Lorsque $\alpha = 1$,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\text{Var}(L_{\mathbf{T}_n^*}^{trap}(g)) \right) - \psi \left(\text{Var}(L(g)) \right) \right) \\ &= \frac{\text{trace}(\mathbf{M})}{12} \lambda_1 \left(\int_0^1 \left\{ \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t) \right\}^{1/3} dt \right)^3. \end{aligned}$$

3.7 Preuves des résultats

3.7.1 Preuve du Théorème 3.2.1

Dans tout ce qui suit, pour faciliter la présentation on écrit t_k à la place de $t_{n,k}$. On note par $u^{(l)}$ la dérivée d'ordre l de la fonction u , l étant un entier positif.

Preuve du Lemme 3.2.1

D'un côté, on a

$$\begin{aligned} s^2 &= \int_0^1 f(t) \varphi(t) dt \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \varphi(t) R(t-s) \varphi(s) dt ds \\ &= \int_0^1 \int_0^1 u(t) u(s) R(t-s) h(t) h(s) dt ds \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} u(t) u(s) R(t-s) h(t) h(s) dt ds, \end{aligned}$$

où $u(t) = (\varphi/h)(t)$. De l'autre côté,

$$\begin{aligned} \text{Var}(L_n(X)) &= \frac{1}{4n^2} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ u(t_i) u(t_j) R(t_i - t_j) + u(t_i) u(t_{j+1}) R(t_i - t_{j+1}) \right. \\ &\quad \left. + u(t_{i+1}) u(t_j) R(t_{i+1} - t_j) + u(t_{i+1}) u(t_{j+1}) R(t_{i+1} - t_{j+1}) \right\}. \end{aligned}$$

On décompose la variance résiduelle de la manière suivante :

$$\text{Var}(L_n(X)) - s^2 = \sum_{i,j} Z_{i,j} = \sum_{k=0}^{n-1} Z_{k,k} + \sum_{i \neq j} Z_{i,j}, \quad (3.32)$$

où

$$\begin{aligned} Z_{i,j} = & \frac{1}{4n^2} \left\{ u(t_i)u(t_j)R(t_i - t_j) + u(t_i)u(t_{j+1})R(t_i - t_{j+1}) \right. \\ & + u(t_{i+1})u(t_j)R(t_{i+1} - t_j) + u(t_{i+1})u(t_{j+1})R(t_{i+1} - t_{j+1}) \left. \right\} \\ & - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} u(t)u(s)R(t-s)h(t)h(s) dt ds. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Développement du terme diagonal $Z_{k,k}, k = 0, \dots, n-1$

On a

$$\begin{aligned} Z_{k,k} = & \frac{1}{4n^2} [(u^2(t_k) + u^2(t_{k+1}))R(0) + 2u(t_k)u(t_{k+1})R(t_{k+1} - t_k)] \\ & - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} R(t-s)(uh)(t)(uh)(s) dt ds. \end{aligned}$$

Selon (3.1), on peut écrire

$$\begin{aligned} R(\Delta t_k) &= R(0) - \frac{1}{2}\lambda_\alpha(\Delta^\alpha t_k) + o(\Delta^\alpha t_k), \\ R(t-s) &= R(0) - \frac{1}{2}\lambda_\alpha|t-s|^\alpha + o(|t-s|^\alpha), \end{aligned} \quad (3.34)$$

où $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$. En remplaçant ces deux développements, on obtient

$$Z_{k,k} = a_{0,k}R(0) - \frac{1}{2}\lambda_\alpha a_{2,k}(\alpha) + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right),$$

où

$$\begin{aligned} a_{0,k} &\triangleq \frac{1}{4n^2}(u(t_k) + u(t_{k+1}))^2 - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (uh)(t)(uh)(s) dt ds, \\ a_{2,k}(\alpha) &\triangleq \frac{1}{2n^2}u(t_k)u(t_{k+1})(\Delta^\alpha t_k) - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} |t-s|^\alpha (uh)(t)(uh)(s) dt ds. \end{aligned}$$

Pour évaluer $a_{0,k}$, on développe u et h selon la formule de Taylor autour de t_k jusqu'à l'ordre 2 d'après l'hypothèse (H4)

$$\begin{aligned} u(t_{k+1}) &= u(t_k) + \Delta t_k u^{(1)}(t_k) + \frac{\Delta^2 t_k}{2} u^{(2)}(t_k) + o(\Delta^2 t_k), \\ h(t_{k+1}) &= h(t_k) + \Delta t_k h^{(1)}(t_k) + \frac{\Delta^2 t_k}{2} h^{(2)}(t_k) + o(\Delta^2 t_k), \end{aligned} \quad (3.35)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} &= \int_{t_k}^{t_{k+1}} h(t) dt \\ &= \Delta t_k h(t_k) + \frac{\Delta^2 t_k}{2} h^{(1)}(t_k) + \frac{\Delta^3 t_k}{6} h^{(2)}(t_k) + o(\Delta^3 t_k). \end{aligned} \quad (3.36)$$

On peut vérifier que pour $l = 0, 1, 2$

$$\begin{aligned} &\int_{t_k}^{t_{k+1}} (t - t_k)^l (uh)(t) dt \\ &= \frac{\Delta^{l+1} t_k}{l+1} (uh)(t_k) + \frac{\Delta^{l+2} t_k}{l+2} (uh)^{(1)}(t_k) + \frac{\Delta^{l+3} t_k}{2(l+3)} (uh)^{(2)}(t_k) + o(\Delta^{l+3} t_k). \end{aligned} \quad (3.37)$$

On obtient ainsi

$$a_{0,k} = \frac{1}{6} \Delta^4 t_k u(t_k) h(t_k) [u^{(2)}(t_k) h(t_k) - u^{(1)}(t_k) h^{(1)}(t_k)] + o(\Delta^4 t_k).$$

Pour l'évaluation asymptotique de $a_{2,k}(\alpha)$, on calcule d'abord

$$\begin{aligned} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} |t - s|^\alpha (uh)(t) (uh)(s) dt ds &= 2 \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t (t - s)^\alpha (uh)(t) (uh)(s) dt ds \\ &= 2 \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t (t - s)^\alpha (u(t_k) h(t_k) + o(1)) \\ &\quad \times (u(t_k) h(t_k) + o(1)) dt ds \\ &= 2u^2(t_k) h^2(t_k) \frac{\Delta^{2+\alpha} t_k}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} + o(\Delta^{2+\alpha} t_k), \end{aligned}$$

et on obtient

$$\begin{aligned} a_{2,k}(\alpha) &= \frac{1}{2} \{ \Delta t_k h(t_k) + o(\Delta t_k) \}^2 u(t_k) \{ u(t_k) + o(1) \} \Delta^\alpha t_k \\ &\quad - 2 \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t (t - s)^\alpha (u(t_k) h(t_k) + o(1)) (u(t_k) h(t_k) + o(1)) dt ds \\ &= \frac{1}{2} u^2(t_k) h^2(t_k) \Delta^{2+\alpha} t_k - 2u^2(t_k) h^2(t_k) \frac{\Delta^{2+\alpha} t_k}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} + o(\Delta^{2+\alpha} t_k) \\ &= \frac{\alpha^2 + 3\alpha - 2}{2(\alpha + 1)(\alpha + 2)} u^2(t_k) h^2(t_k) \Delta^{2+\alpha} t_k + o(\Delta^{2+\alpha} t_k). \end{aligned}$$

Il s'ensuit que le terme dominant de $Z_{k,k}$ est $a_{2,k}(\alpha)$ d'ordre $\Delta^{2+\alpha} t_k$, puis en utilisant (3.36), on obtient

$$n^{1+\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} Z_{k,k} \longrightarrow -\frac{\alpha^2 + 3\alpha - 2}{4(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \lambda_\alpha \int_0^1 u^2(t) h^{1-\alpha}(t) dt. \quad (3.38)$$

Développement du terme $Z_{i,j}$, $i \neq j$ ($i, j = 0, \dots, n-1$) en (3.33)

CHAPITRE 3 : *Extensions aux processus stationnaires de Hölder*

On procédera de la manière suivante : Quand $t_i - t_j$ est petit, on utilise l'approximation de $R(t_i - t_j)$ via $|t_i - t_j|^\alpha$, tandis que lorsque $t_i - t_j$ est éloigné de zéro, on utilise le développement de Taylor standard en fonction des dérivées existantes de R en dehors de zéro. A cet effet, on choisit une suite de nombres entiers N_n tel que quand $n \rightarrow \infty$

$$N_n \rightarrow \infty \text{ et } \frac{N_n}{n} \rightarrow 0.$$

Ensuite, comme

$$\frac{i - j}{n} = \int_{t_j}^{t_i} h(t) dt = h(\xi_{i,j})(t_i - t_j),$$

où $\xi_{i,j}$ est entre t_i et t_j , et il existe deux constantes H_1, H_2 avec $0 < H_1 \leq |h(t)| \leq H_2 < \infty$ telles que

$$\begin{aligned} |i - j| > N_n & \text{ implique } |t_i - t_j| > \frac{N_n}{nH_2}, \\ |i - j| \leq N_n & \text{ implique } |t_i - t_j| \leq \frac{N_n}{nH_1}. \end{aligned}$$

On démontre d'abord que le terme $\sum \sum_{|i-j| > N_n} Z_{i,j}$ tend vers 0 à la vitesse n^{-2} . Pour cela, on peut écrire $Z_{i,j}$ sous la forme suivante :

$$Z_{i,j} = A_{0,i,j}R(t_i - t_j) + A_{1,i,j}R^{(1)}(t_i - t_j) + A_{2,i,j}R^{(2)}(t_i - t_j) + o((t_i - t_j)^2),$$

où on a utilisé le développement de Taylor de $R(t - s)$ autour de $t_i - t_j$ jusqu'à l'ordre 2 suivant :

$$\begin{aligned} R(t - s) &= R(t_i - t_j) + [(t - t_i) - (s - t_j)] R^{(1)}(t_i - t_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(t - t_i) - (s - t_j)]^2 R^{(2)}(t_i - t_j) + o[(t - s) - (t_i - t_j)]^2. \end{aligned}$$

Les développements (3.35), (3.36) et (3.37) avec $l = 0, 1, 2$ donnent

$$\begin{aligned} A_{0,i,j} &\triangleq \frac{1}{4n^2} [u(t_i)u(t_j) + u(t_i)u(t_{j+1}) + u(t_{i+1})u(t_j) + u(t_{i+1})u(t_{j+1})] \\ &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \int_{t_j}^{t_{j+1}} (uh)(s) ds \\ &= \frac{1}{12} \Delta^3 t_i \Delta t_j (u^{(2)}(t_i)h(t_i) - u^{(1)}(t_i)h^{(1)}(t_i)) u(t_j)h(t_j) \\ &\quad + \frac{1}{12} \Delta^3 t_j \Delta t_i (u^{(2)}(t_j)h(t_j) - u^{(1)}(t_j)h^{(1)}(t_j)) u(t_i)h(t_i) + o\left(\frac{1}{n^4}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{1,i,j} &\triangleq \frac{1}{4n^2} [-\Delta t_j u(t_i)u(t_{j+1}) + \Delta t_i u(t_{i+1})u(t_j) + (\Delta t_i - \Delta t_j)u(t_{i+1})u(t_{j+1})] \\ &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t - t_i) - (s - t_j)] (uh)(t)(uh)(s) dt ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \Delta^3 t_i \Delta t_j \left[\frac{1}{2} u^{(1)}(t_i) u(t_j) h(t_i) h(t_j) + \frac{1}{4} u(t_i) u(t_j) h^{(1)}(t_i) h(t_j) - \frac{1}{3} (uh)^{(1)}(t_i) (uh)(t_j) \right] \\
 &\quad + \Delta^3 t_j \Delta t_i \left\{ -\frac{1}{2} u^{(1)}(t_j) u(t_i) h(t_i) h(t_j) - \frac{1}{4} u(t_i) u(t_j) h^{(1)}(t_j) h(t_i) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3} (uh)^{(1)}(t_j) (uh)(t_i) \right\} + o\left(\frac{1}{n^4}\right), \\
 A_{2,i,j} &\triangleq \frac{1}{4n^2} \left[\frac{\Delta^2 t_j}{2} u(t_i) u(t_{j+1}) + \frac{\Delta^2 t_i}{2} u(t_{i+1}) u(t_j) + \frac{(\Delta t_i - \Delta t_j)^2}{2} u(t_{i+1}) u(t_{j+1}) \right] \\
 &\quad - \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t - t_i) - (s - t_j)]^2 (uh)(t) (uh)(s) dt ds \\
 &= \frac{1}{12} \Delta t_i \Delta t_j (uh)(t_i) (uh)(t_j) [\Delta^2 t_i + \Delta^2 t_j] + o\left(\frac{1}{n^4}\right).
 \end{aligned}$$

Par conséquent, la vitesse de convergence pour le terme hors diagonale est de l'ordre n^{-2} , et plus précisément, lorsque $n \rightarrow \infty$, on obtient

$$\begin{aligned}
 n^2 \sum_{|i-j| > N_n} Z_{i,j} &\longrightarrow \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) A_0(t,s) dt ds + \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) A_1(t,s) dt ds \\
 &\quad + \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) A_2(t,s) dt ds,
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

où

$$\begin{aligned}
 A_0(t,s) &\triangleq \frac{1}{12h^2(t)} [u^{(2)}(t)h(t) - u^{(1)}(t)h^{(1)}(t)] u(s)h(s) \\
 &\quad + \frac{1}{12h^2(s)} [u^{(2)}(s)h(s) - u^{(1)}(s)h^{(1)}(s)] u(t)h(t) \\
 &= \frac{1}{12} \left[\left(\frac{u^{(1)}}{h}\right)^{(1)}(t) u(s)h(s) + \left(\frac{u^{(1)}}{h}\right)^{(1)}(s) u(t)h(t) \right], \\
 A_1(t,s) &\triangleq -\frac{1}{6h^2(t)} \left(u^{(1)}(t)h(t) - \frac{1}{2} u(t)h^{(1)}(t) \right) u(s)h(s) \\
 &\quad - \frac{1}{6h^2(s)} \left(u^{(1)}(s)h(s) - \frac{1}{2} u(s)h^{(1)}(s) \right) u(t)h(t) \\
 &= -\frac{1}{12} u(s)h(s) \left[\left(\frac{u^{(1)}}{h}\right)(t) + \left(\frac{u}{h}\right)^{(1)}(t) \right] \\
 &\quad - \frac{1}{12} u(t)h(t) \left[\left(\frac{u^{(1)}}{h}\right)(s) + \left(\frac{u}{h}\right)^{(1)}(s) \right], \\
 A_2(t,s) &\triangleq \frac{1}{12} \left(\frac{u(t)h(t)u(s)h(s)}{h^2(s)} + \frac{u(t)h(t)u(s)h(s)}{h^2(t)} \right) \\
 &= \frac{1}{12} u(t)u(s) \left(\frac{h(t)}{h(s)} + \frac{h(s)}{h(t)} \right).
 \end{aligned}$$

Par symétrie de $A_0(t, s)$, $A_1(t, s)$, $A_2(t, s)$, on a également

$$\begin{aligned} n^2 \sum \sum_{|i-j| > N_n} Z_{i,j} \longrightarrow & \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) B_0(s)(uh)(t) dt ds \quad (3.40) \\ & - \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) B_1(s)(uh)(t) dt ds \\ & + \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) B_2(s)(uh)(t) dt ds, \end{aligned}$$

où

$$B_0(t) \triangleq \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)^{(1)}(t), \quad (3.41)$$

$$B_1(t) \triangleq \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)(t) + \left(\frac{u}{h} \right)^{(1)}(t), \quad (3.42)$$

$$B_2(t) \triangleq \left(\frac{u}{h} \right)(t). \quad (3.43)$$

Maintenant, on considère le terme $\sum \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} Z_{i,j}$. En utilisant le développement de Taylor de $R(\cdot)$ autour de 0 selon (3.1), quand $|i-j| \leq N_n$, on peut écrire $Z_{i,j}$ sous la forme suivante :

$$Z_{i,j} = a_{0,i,j} R(0) - \frac{1}{2} \lambda_\alpha a_{2,i,j}(\alpha) + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right),$$

où

$$\begin{aligned} a_{0,i,j} & \triangleq \frac{1}{4n^2} (u(t_i) + u(t_{i+1}))(u(t_j) + u(t_{j+1})) - \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \int_{t_j}^{t_{j+1}} (uh)(s) ds, \\ a_{2,i,j}(\alpha) & \triangleq \frac{1}{4n^2} \left\{ u(t_i)u(t_j)|t_i - t_j|^\alpha + u(t_i)u(t_{j+1})|t_i - t_{j+1}|^\alpha \right. \\ & \quad \left. + u(t_{i+1})u(t_j)|t_{i+1} - t_j|^\alpha + u(t_{i+1})u(t_{j+1})|t_{i+1} - t_{j+1}|^\alpha \right\} \\ & \quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} |t-s|^\alpha (uh)(t)(uh)(s) dt ds. \end{aligned}$$

Pour évaluer $a_{0,i,j}$, on utilise le développement de Taylor selon (3.35), (3.36) et (3.37) avec $l = 0$, et on obtient

$$\begin{aligned} a_{0,i,j} & = \frac{1}{12} \Delta^3 t_i \Delta t_j (u^{(2)}(t_i)h(t_i) - u^{(1)}(t_i)h^{(1)}(t_i)) u(t_j)h(t_j) \\ & \quad + \frac{1}{12} \Delta^3 t_j \Delta t_i (u^{(2)}(t_j)h(t_j) - u^{(1)}(t_j)h^{(1)}(t_j)) u(t_i)h(t_i) + o\left(\frac{1}{n^4}\right), \end{aligned}$$

et ainsi

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{|i-j| \leq N_n} a_{0,i,j} & \longrightarrow \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 B_0(s)(uh)(t) dt ds \quad (3.44) \\ & = \frac{1}{6} \int_0^1 (uh)(t) dt \left(\left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)(1) - \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right)(0) \right). \end{aligned}$$

CHAPITRE 3 : *Extensions aux processus stationnaires de Hölder*

Pour l'évaluation de $a_{2,i,j}(\alpha)$, on utilise le développement de Taylor standard en ne gardant que les termes du premier ordre et on obtient

$$\begin{aligned}
 a_{2,i,j}(\alpha) &= \frac{1}{4} \{ \Delta t_i h(t_i) + o(1) \} \{ \Delta t_j h(t_j) + o(1) \} \\
 &\times \left\{ u(t_i)u(t_j)|t_i - t_j|^\alpha + u(t_i)u(t_{j+1})|t_i - t_{j+1}|^\alpha \right. \\
 &\left. + u(t_{i+1})u(t_j)|t_{i+1} - t_j|^\alpha + u(t_{i+1})u(t_{j+1})|t_{i+1} - t_{j+1}|^\alpha \right\} \\
 &- \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} |t - s|^\alpha ((uh)(t_i) + o(1))((uh)(t_j) + o(1)) dt ds \\
 &= (uh)(t_i)(uh)(t_j) \left\{ \frac{1}{4} \Delta t_i \Delta t_j [|t_i - t_j|^\alpha + |t_i - t_{j+1}|^\alpha \right. \\
 &+ |t_{i+1} - t_j|^\alpha + |t_{i+1} - t_{j+1}|^\alpha] \\
 &- \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} [|t_{i+1} - t_j|^{\alpha+2} - |t_i - t_j|^{\alpha+2} \\
 &- |t_{i+1} - t_{j+1}|^{\alpha+2} + |t_i - t_{j+1}|^{\alpha+2}] \left. \right\} + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right) \\
 &= \frac{u^2(t_i \vee t_j)}{n^{2+\alpha} h^\alpha(t_i \vee t_j)} \left\{ \frac{1}{4} [2|i - j|^\alpha + |i - j - 1|^\alpha \right. \\
 &+ |i - j + 1|^\alpha] - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} [|i - j + 1|^{\alpha+2} \\
 &+ |i - j - 1|^{\alpha+2} - 2|i - j|^{\alpha+2}] \left. \right\}.
 \end{aligned}$$

Maintenant, on réorganise les sommations doubles comme suit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} Z_{i,j} &= \sum_{0 < i-j \leq N_n} Z_{i,j} + \sum_{0 < j-i \leq N_n} Z_{i,j} \\
 &= \sum_{p=i-j=1}^{N_n} \sum_{j=0}^{n-1} Z_{i,j} + \sum_{p=j-i=1}^{N_n} \sum_{i=0}^{n-1} Z_{i,j},
 \end{aligned}$$

et ainsi on trouve

$$\sum_{0 < |i-j| \leq N_n} a_{2,i,j}(\alpha) = \frac{2}{n^{2+\alpha}} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{u^2(t_i)}{h^\alpha(t_i)} \times S_{1,n}(\alpha),$$

où

$$\begin{aligned}
 S_{1,n}(\alpha) &= \sum_{p=1}^{N_n} \left\{ \frac{1}{4} [2p^\alpha + (p-1)^\alpha + (p+1)^\alpha] \right. \\
 &\left. - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} [(p+1)^{\alpha+2} + (p-1)^{\alpha+2} - 2p^{\alpha+2}] \right\}.
 \end{aligned}$$

La première somme converge comme d'habitude

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{u^2(t_i)}{h^\alpha(t_i)} \longrightarrow \int_0^1 u^2(t) h^{1-\alpha}(t) dt = \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt.$$

La seconde somme peut être réécrite comme suit :

$$\begin{aligned} S_{1,n}(\alpha) &= \frac{1}{4} \left\{ 4 \sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha + (N_n + 1)^\alpha - 1 - N_n^\alpha \right\} \\ &\quad - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \left\{ (N_n + 1)^{\alpha+2} - 1 - N_n^{\alpha+2} \right\} \\ &= \sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \left\{ (N_n + 1)^{\alpha+2} - N_n^{\alpha+2} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{4} \left\{ (N_n + 1)^\alpha - N_n^\alpha \right\} - \left\{ \frac{1}{4} - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \right\}. \end{aligned}$$

Quand $0 < \alpha < 1$, $(N_n + 1)^\alpha - N_n^\alpha \longrightarrow 0$,

$$\sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha = \zeta(-\alpha) + \frac{N_n^{\alpha+1}}{\alpha + 1} + \frac{N_n^\alpha}{2} + o(1), \quad (3.45)$$

$$(N_n + 1)^{\alpha+2} = N_n^{\alpha+2} + (\alpha + 2)N_n^{\alpha+1} + \frac{(\alpha + 2)(\alpha + 1)}{2} N_n^\alpha + o(1).$$

Quand $1 < \alpha < 2$, $(N_n + 1)^\alpha - N_n^\alpha \longrightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha &= \zeta(-\alpha) + \frac{N_n^{\alpha+1}}{\alpha + 1} + \frac{N_n^\alpha}{2} + \frac{\alpha}{12} N_n^{\alpha-1} + o(1), \\ (N_n + 1)^{\alpha+2} &= N_n^{\alpha+2} + (\alpha + 2)N_n^{\alpha+1} + \frac{(\alpha + 2)(\alpha + 1)}{2} N_n^\alpha \\ &\quad + \frac{(\alpha + 2)(\alpha + 1)\alpha}{6} N_n^{\alpha-1} + o(1). \end{aligned}$$

Pour l'expression (3.45), voir par exemple Berndt et Joshi (1983). On en déduit que quand $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \left\{ (N_n + 1)^{\alpha+2} - N_n^{\alpha+2} \right\} \\ = \zeta(-\alpha) + o(1), \end{aligned}$$

et quand $1 < \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^{N_n} p^\alpha - \frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \left\{ (N_n + 1)^{\alpha+2} - N_n^{\alpha+2} \right\} \\ = \zeta(-\alpha) - \frac{\alpha}{12} N_n^{\alpha-1} + o(1). \end{aligned}$$

CHAPITRE 3 : *Extensions aux processus stationnaires de Hölder*

Par conséquent, lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$S_{1,n}(\alpha) \longrightarrow \zeta(-\alpha) - \frac{\alpha^2 + 3\alpha - 2}{4(\alpha + 1)(\alpha + 2)},$$

et par contre quand $1 < \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} S_{1,n}(\alpha) &\longrightarrow \infty, \\ \text{mais } n^{1-\alpha} S_{1,n}(\alpha) &\longrightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Pour $\alpha = 1$, on a $S_{1,n}(\alpha) = 0$ pour tout n .

Il s'ensuit que lorsque $0 < \alpha < 1$

$$n^{1+\alpha} \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} a_{2,i,j}(\alpha) \longrightarrow 2 \left\{ \zeta(-\alpha) - \frac{\alpha^2 + 3\alpha - 2}{4(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \right\} \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt,$$

et quand $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} a_{2,i,j}(\alpha) &= 2n^{1-\alpha} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{u^2(t_i)}{h^\alpha(t_i)} S_{1,n}(\alpha) \\ &\approx 2n^{1-\alpha} S_{1,n}(\alpha) \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt \longrightarrow 0, \text{ d'après (3.46)}. \end{aligned}$$

Pour $0 < \alpha < 1$, le terme dominant pour la vitesse de convergence est $a_{2,i,j}(\alpha)$. En combinant les termes, on obtient

$$n^{1+\alpha} \sum_{i \neq j} Z_{i,j}(\alpha) \longrightarrow - \left\{ \zeta(-\alpha) - \frac{\alpha^2 + 3\alpha - 2}{4(\alpha + 1)(\alpha + 2)} \right\} \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt.$$

Enfin, en regroupant les termes diagonaux et hors diagonaux, on obtient

$$n^{1+\alpha} \sum_{i,j} Z_{i,j}(\alpha) \longrightarrow -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt.$$

Lorsque $1 < \alpha < 2$, les résultats asymptotiques (3.40) et (3.44) permettent d'obtenir l'expression asymptotique du terme hors de la diagonale ($i \neq j$) qui est donnée par

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} &\longrightarrow \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) B_0(s)(uh)(t) dt ds \\ &\quad - \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) B_1(s)(uh)(t) dt ds \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) B_2(s)(uh)(t) dt ds \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_0^1 \int_0^1 R(0) B_0(s)(uh)(t) dt ds. \end{aligned}$$

CHAPITRE 3 : Extensions aux processus stationnaires de Hölder

Pour $1 < \alpha < 2$ alors $R^{(1)}(0\pm)$ existent et sont égaux à zéro. Par conséquent, nous pouvons utiliser l'intégration par parties de la constante asymptotique ci-dessus pour obtenir

$$n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} \longrightarrow 2Q_1,$$

où

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{12} \int_0^1 \left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt \\ &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left[R(t) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (uh)(t) dt \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 (uh)(t) dt \left(\left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0), \end{aligned} \quad (3.47)$$

et par conséquent,

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{i,j} Z_{i,j} &= n^2 \sum_k Z_{k,k} + n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} \\ &= o(1) + n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} \longrightarrow 2Q_1, \end{aligned}$$

où $o(1)$ est déduit du résultat asymptotique (3.38).

Pour $\alpha = 1$, il y a une contribution du terme diagonale qui provient de (3.38)

$$n^2 \sum_k Z_{k,k} \longrightarrow -\frac{1}{12} \lambda_1 \int_0^1 u^2(t) dt,$$

et comme

$$n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} \longrightarrow 2Q_1,$$

alors

$$n^2 \sum_{i,j} Z_{i,j} = n^2 \sum_k Z_{k,k} + n^2 \sum_{i \neq j} Z_{i,j} \longrightarrow -\frac{1}{12} \lambda_1 \int_0^1 u^2(t) dt + 2Q_1.$$

Preuve du Lemme 3.2.2

On écrit d'abord $L_n(f)$ sous la forme suivante.

$$\begin{aligned}
 L_n(f) &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\left(\frac{f\varphi}{h} \right)(t_i) + \left(\frac{f\varphi}{h} \right)(t_{i+1}) \right) \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \int_0^1 [u(t_i)R(t_i, s) + u(t_{i+1})R(t_{i+1}, s)] \varphi(s) ds \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [u(t_i)R(t_i, s) + u(t_{i+1})R(t_{i+1}, s)] (uh)(s) ds, \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [u(t_i)R(t_i - s) + u(t_{i+1})R(t_{i+1} - s)] (uh)(s) ds.
 \end{aligned}$$

En écrivant aussi le terme $I(f)$ sous la forme écrite au début de la preuve du Lemme 3.2.1, la différence entre les deux termes peut s'écrire sous la forme

$$L_n(f) - I(f) = \sum_{i,j} Y_{i,j} = \sum_{k=0}^{n-1} Y_{k,k} + \sum_{i \neq j} Y_{i,j}, \quad (3.48)$$

où

$$\begin{aligned}
 Y_{i,j} &= \frac{1}{2n} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [u(t_i)R(t_i - s) + u(t_{i+1})R(t_{i+1} - s)] (uh)(s) ds \\
 &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} u(t)u(s)R(t - s)h(t)h(s) dt ds. \quad (3.49)
 \end{aligned}$$

Développement du terme diagonal $Y_{k,k}$, $k = 0, \dots, n-1$

On a

$$\begin{aligned}
 Y_{k,k} &= \frac{1}{2n} \int_{t_k}^{t_{k+1}} [u(t_k)R(t_k - t) + u(t_{k+1})R(t_{k+1} - t)] (uh)(t) dt \\
 &\quad - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} R(t - s)(uh)(t)(uh)(s) dt ds.
 \end{aligned}$$

Selon (3.1), on peut écrire

$$Y_{k,k} = b_{0,k}R(0) - \frac{1}{2}\lambda_\alpha b_{2,k}(\alpha) + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right),$$

où

$$\begin{aligned}
 b_{0,k} &\triangleq \frac{1}{2n} (u(t_k) + u(t_{k+1})) \int_{t_k}^{t_{k+1}} (uh)(t) dt - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (uh)(t)(uh)(s) dt ds, \\
 b_{2,k}(\alpha) &\triangleq \frac{1}{2n} \int_{t_k}^{t_{k+1}} [u(t_k)|t - t_k|^\alpha + u(t_{k+1})|t - t_{k+1}|^\alpha] (uh)(t) dt \\
 &\quad - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} |t - s|^\alpha (uh)(t)(uh)(s) dt ds.
 \end{aligned}$$

De (3.35), (3.36) et (3.37), on a

$$b_{0,k} = \frac{1}{12} \Delta^4 t_k u(t_k) h(t_k) (u^{(2)}(t_k) h(t_k) - u^{(1)}(t_k) h^{(1)}(t_k)) + o(\Delta^4 t_k),$$

et

$$\begin{aligned} b_{2,k}(\alpha) &= \frac{1}{2} \{h(t_k) \Delta t_k + o(\Delta t_k)\} \left\{ u(t_k) \frac{\Delta^{\alpha+1} t_k}{\alpha+1} + (u(t_k) + o(1)) \frac{\Delta^{\alpha+1} t_k}{\alpha+1} \right\} \\ &\quad \times \{u(t_k) h(t_k) + o(1)\} - 2 \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t (t-s)^\alpha \{u(t_k) h(t_k) + o(t-t_k)\} \\ &\quad \times \{u(t_k) h(t_k) + o(s-t_k)\} dt ds \\ &= u^2(t_k) h^2(t_k) \frac{\Delta^{\alpha+2} t_k}{\alpha+1} - 2u^2(t_k) h^2(t_k) \frac{\Delta^{\alpha+2} t_k}{(\alpha+1)(\alpha+2)} + o(\Delta^{\alpha+2} t_k) \\ &= \frac{\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)} u^2(t_k) h^2(t_k) \Delta^{\alpha+2} t_k + o(\Delta^{\alpha+2} t_k). \end{aligned}$$

Il s'ensuit que le terme dominant de $Y_{k,k}$ est $b_{2,k}(\alpha)$ d'ordre $\Delta^{2+\alpha} t_k$, puis en utilisant (3.36), on obtient

$$n^{1+\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} Y_{k,k} \longrightarrow -\frac{1}{2(\alpha+1)(\alpha+2)} \lambda_\alpha \int_0^1 u^2(t) h^{1-\alpha}(t) dt. \quad (3.50)$$

Développement du terme $Y_{i,j}$, $i \neq j$ ($i, j = 0, \dots, n-1$)

En s'inspirant de la méthode de démonstration du Lemme précédent, on démontre d'abord que le terme $\sum \sum_{|i-j| > N_n} Y_{i,j}$ tend vers 0 à une vitesse n^{-2} . Pour cela, on peut écrire $Y_{i,j}$ sous la forme suivante :

$$Y_{i,j} = B_{0,i,j} R(t_i - t_j) + B_{1,i,j} R^{(1)}(t_i - t_j) + B_{2,i,j} R^{(2)}(t_i - t_j) + o((t_i - t_j)^2),$$

et en utilisant (3.35), (3.36) et (3.37) avec $l = 0, 1, 2$, on a

$$\begin{aligned} B_{0,i,j} &\triangleq \frac{1}{2n} [u(t_j) + u(t_{j+1})] \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt - \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \int_{t_j}^{t_{j+1}} (uh)(s) ds \\ &= \frac{1}{12} \Delta t_i \Delta^3 t_j (u^{(2)}(t_j) h(t_j) - u^{(1)}(t_j) h^{(1)}(t_j)) u(t_i) h(t_i) + o\left(\frac{1}{n^4}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{1,i,j} &\triangleq \frac{1}{2n} \left\{ u(t_j) \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t-t_i)(uh)(t) dt + u(t_{j+1}) \int_{t_i}^{t_{i+1}} [(t-t_i) - \Delta t_j] (uh)(t) dt \right\} \\ &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t-t_i) - (s-t_j)] (uh)(t)(uh)(s) dt ds \\ &= \frac{1}{2n} \left\{ (u(t_j) + u(t_{j+1})) \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t-t_i)(uh)(t) dt - \Delta t_j u(t_{j+1}) \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \right\} \\ &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t-t_i) - (s-t_j)] (uh)(t)(uh)(s) dt ds \\ &= \frac{1}{6} \Delta^3 t_j \Delta t_i u(t_i) h(t_i) \left[-u^{(1)}(t_j) h(t_j) + \frac{1}{2} u(t_j) h^{(1)}(t_j) \right] + o\left(\frac{1}{n^4}\right), \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 B_{2,i,j} &\triangleq \frac{1}{2n} \left\{ u(t_j) \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{(t-t_i)^2}{2} (uh)(t) dt + u(t_{j+1}) \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{2} [(t-t_i) - \Delta t_j]^2 (uh)(t) dt \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t-t_i) - (s-t_j)]^2 (uh)(t)(uh)(s) dt ds \\
 &= \frac{1}{2n} \left\{ (u(t_j) + u(t_{j+1})) \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{(t-t_i)^2}{2} (uh)(t) dt \right. \\
 &\quad \left. + u(t_{j+1}) \left[-\Delta t_j \int_{t_i}^{t_{i+1}} (t-t_i)(uh)(t) dt + \frac{\Delta^2 t_j}{2} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} [(t-t_i) - (s-t_j)]^2 (uh)(t)(uh)(s) dt ds \\
 &= \frac{1}{2} \Delta t_j h(t_j) \left\{ 2u(t_j)u(t_i)h(t_i) \frac{\Delta^3 t_i}{6} \right. \\
 &\quad \left. + u(t_j) \left[-\Delta t_j \frac{\Delta^2 t_i}{2} u(t_i)h(t_i) + \frac{\Delta^2 t_j}{2} \Delta t_i u(t_i)h(t_i) \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{\Delta^3 t_i}{6} \Delta t_j u(t_i)h(t_i)u(t_j)h(t_j) - \Delta t_i \frac{\Delta^3 t_j}{6} u(t_i)h(t_i)u(t_j)h(t_j) \\
 &\quad + \frac{\Delta^2 t_i}{2} \frac{\Delta^2 t_j}{2} u(t_i)h(t_i)u(t_j)h(t_j) + o\left(\frac{1}{n^4}\right).
 \end{aligned}$$

En négligeant les détails, l'intégrale de Riemann implique le résultat asymptotique pour le terme hors diagonale suivant :

$$\begin{aligned}
 n^2 \sum \sum_{|i-j| > N_n} Y_{i,j} &\longrightarrow \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) B_0(s) (uh)(t) dt ds \quad (3.51) \\
 &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) B_1(s) (uh)(t) dt ds \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) B_2(s) (uh)(t) dt ds,
 \end{aligned}$$

où les fonctions B_0, B_1, B_2 sont définies en (3.41), (3.42) et (3.43).

Maintenant, en utilisant le développement de Taylor de $R(\cdot)$ autour de 0 selon (3.34), quand $|i-j| \leq N_n$, on peut écrire $Y_{i,j}$ sous la forme suivante :

$$Y_{i,j} = b_{0,i,j} R(0) - \frac{1}{2} \lambda_\alpha b_{2,i,j}(\alpha) + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right),$$

où

$$\begin{aligned}
 b_{0,i,j} &\triangleq \frac{1}{2n} [u(t_j) + u(t_{j+1})] \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt - \int_{t_i}^{t_{i+1}} (uh)(t) dt \int_{t_j}^{t_{j+1}} (uh)(s) ds \\
 &= \frac{1}{12} \Delta t_i \Delta^3 t_j (u^{(2)}(t_j)h(t_j) - u^{(1)}(t_j)h^{(1)}(t_j)) u(t_i)h(t_i) + o\left(\frac{1}{n^4}\right),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b_{2,i,j}(\alpha) &\triangleq \frac{1}{2n} \int_{t_i}^{t_{i+1}} [u(t_j)|t-t_j|^\alpha + (u(t_j) + o(1))|t-t_{j+1}|^\alpha] \\
 &\quad \times [u(t_i)h(t_i) + o(|t-t_i|^\alpha)] dt \\
 &\quad - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_j}^{t_{j+1}} |t-s|^\alpha \{u(t_i)h(t_i) + o(|t-t_i|^\alpha)\} \{u(t_j)h(t_j) + o(|s-t_j|^\alpha)\} dt ds \\
 &= \frac{1}{2n} u(t_i)h(t_i)u(t_j) \left\{ \frac{|t_{i+1}-t_j|^{\alpha+1}}{\alpha+1} - \frac{|t_i-t_j|^{\alpha+1}}{\alpha+1} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{|t_{i+1}-t_{j+1}|^{\alpha+1}}{\alpha+1} - \frac{|t_i-t_{j+1}|^{\alpha+1}}{\alpha+1} \right\} \\
 &\quad - \frac{u(t_i)h(t_i)u(t_j)h(t_j)}{(\alpha+1)(\alpha+2)} \left\{ |t_{i+1}-t_j|^{\alpha+2} - |t_i-t_j|^{\alpha+2} \right. \\
 &\quad \left. - |t_{i+1}-t_{j+1}|^{\alpha+2} + |t_i-t_{j+1}|^{\alpha+2} \right\} + o\left(\frac{1}{n^{\alpha+2}}\right) \\
 &= \frac{u^2(t_i \vee t_j)}{n^{2+\alpha}(\alpha+1)h^\alpha(t_i \vee t_j)} \left\{ \frac{1}{2} [|i-j+1|^{\alpha+1} - |i-j-1|^{\alpha+1}] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{\alpha+2} [|i-j+1|^{\alpha+2} - 2|i-j|^{\alpha+2} + |i-j-1|^{\alpha+2}] \right\}.
 \end{aligned}$$

Il est clair que quand $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
 n^2 \sum_{|i-j| \leq N_n} b_{0,i,j} &\longrightarrow \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 B_0(s)(uh)(t) dt ds \quad (3.52) \\
 &= \frac{1}{12} \int_0^1 (uh)(t) dt \left(\left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u^{(1)}}{h} \right) (0) \right).
 \end{aligned}$$

En réorganisant les sommations doubles, on trouve

$$\begin{aligned}
 \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} b_{2,i,j}(\alpha) &= \sum_{p=i-j=1}^{N_n} \sum_{j=0}^{n-1} b_{2,i,j}(\alpha) + \sum_{p=j-i=1}^{N_n} \sum_{i=0}^{n-1} b_{2,i,j}(\alpha) \\
 &= \frac{2}{n^{2+\alpha}(\alpha+1)} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{u^2(t_i)}{h^\alpha(t_i)} \times S_{2,n}(\alpha).
 \end{aligned}$$

La seconde somme peut être réécrite comme suit :

$$\begin{aligned}
 S_{2,n}(\alpha) &= \sum_{p=1}^{N_n} \left\{ \frac{1}{2} [(p+1)^{\alpha+1} - (p-1)^{\alpha+1}] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{\alpha+2} [(p+1)^{\alpha+2} - 2p^{\alpha+2} + (p-1)^{\alpha+2}] \right\} \\
 &= \frac{1}{2} [N_n^{\alpha+1} + (N_n+1)^{\alpha+1} - 1] \\
 &\quad - \frac{1}{\alpha+2} [-1 + (N_n+1)^{\alpha+2} - N_n^{\alpha+2}].
 \end{aligned}$$

De même, on distingue les cas, $0 < \alpha < 1$, $1 < \alpha < 2$ et $\alpha = 1$.

Pour $0 < \alpha < 1$, on a

$$S_{2,n}(\alpha) = -\frac{\alpha}{2(\alpha+2)} + o(1) \longrightarrow -\frac{\alpha}{2(\alpha+2)},$$

pour $1 < \alpha < 2$, on a

$$S_{2,n}(\alpha) = -\frac{\alpha}{2(\alpha+2)} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{12} N_n^{\alpha-1} + o(1) \longrightarrow \infty \text{ et } n^{1-\alpha} S_{2,n}(\alpha) \longrightarrow 0.$$

Pour $\alpha = 1$, on a $S_{2,n}(\alpha) = 0$ pour tout n .

En procédant de la même manière que le Lemme 3.2.1, on obtient

pour $0 < \alpha < 1$,

$$n^{1+\alpha} \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} b_{2,i,j}(\alpha) \longrightarrow -\frac{\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)} \int_0^1 u^2(t) h^{1-\alpha}(t) dt,$$

et pour $1 \leq \alpha < 2$,

$$n^2 \sum_{0 < |i-j| \leq N_n} b_{2,i,j}(\alpha) \longrightarrow 0.$$

Quand $0 < \alpha < 1$, la vitesse de convergence dominante est d'ordre $n^{-(1+\alpha)}$, on obtient donc pour le terme hors diagonale :

$$n^{1+\alpha} \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \longrightarrow \frac{1}{2(\alpha+1)(\alpha+2)} \lambda_\alpha \int_0^1 u^2(t) h^{1-\alpha}(t) dt.$$

Enfin, en combinant les résultats asymptotiques des termes diagonaux et hors diagonaux, lorsque $0 < \alpha < 1$, on obtient :

$$n^{1+\alpha} \sum_{i,j} Y_{i,j} \longrightarrow 0.$$

Pour $1 < \alpha < 2$, les résultats asymptotiques (3.51) et (3.52) permettent d'obtenir l'expression asymptotique du terme hors de la diagonale ($i \neq j$) qui est donnée par

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \longrightarrow & \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) B_0(s)(uh)(t) dt ds \\ & - \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) B_1(s)(uh)(t) dt ds \\ & + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) B_2(s)(uh)(t) dt ds \\ & + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R(0) B_0(s)(uh)(t) dt ds. \end{aligned}$$

L'intégration par parties de la constante asymptotique ci-dessus donne

$$n^2 \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \longrightarrow Q_1,$$

où Q_1 est définie par (3.47).

Alors,

$$\begin{aligned} n^2 \sum_{i,j} Y_{i,j} &= n^2 \sum_k Y_{k,k} + n^2 \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \\ &= o(1) + n^2 \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \longrightarrow Q_1, \end{aligned}$$

où $o(1)$ est déduit du résultat asymptotique (3.50).

Pour $\alpha = 1$, il y a une contribution du terme diagonale qui provient de (3.50)

$$n^2 \sum_k Y_{k,k} \longrightarrow -\frac{1}{12} \lambda_1 \int_0^1 u^2(t) dt,$$

alors

$$n^2 \sum_{i,j} Y_{i,j} = n^2 \sum_k Y_{k,k} + n^2 \sum_{i \neq j} Y_{i,j} \longrightarrow -\frac{1}{12} \lambda_1 \int_0^1 u^2(t) dt + Q_1.$$

Preuve du Théorème 3.2.1

En utilisant la formule (3.5) et en combinant les résultats des lemmes 3.2.1, 3.2.2 et le fait que

$$L_n(f) \longrightarrow s^2 = I(f) \text{ quand } n \rightarrow \infty,$$

on obtient finalement (3.10).

Lorsque $0 < \alpha \leq 1$, on montre que le plan d'échantillonnage \mathbf{T}_n^* est engendré, par la densité $h^*(t)$ définie par (3.11) et (3.13) qui minimise la constante asymptotique. Pour celà, on pose

$$D_\varphi^\alpha(h) = \int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt.$$

Par une application directe de l'inégalité de Hölder de paramètres $p_\alpha = \alpha + 2, q_\alpha = \frac{\alpha+2}{1+\alpha}$ avec $0 < \alpha \leq 1$, on obtient

$$\begin{aligned} D_\varphi^\alpha(h^*) &= \left(\int_0^1 \{\varphi^2(t)\}^{1/(\alpha+2)} dt \right)^{\alpha+2} \\ &= \left(\int_0^1 \left(\frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right)^{1/(\alpha+2)} h^{\frac{1+\alpha}{\alpha+2}}(t) dt \right)^{\alpha+2} \\ &\leq \left(\int_0^1 \frac{\varphi^2(t)}{h^{1+\alpha}(t)} dt \right) \left(\int_0^1 h(t) dt \right)^{1+\alpha} \\ &= D_\varphi^\alpha(h), \end{aligned}$$

où h désigne une densité positive arbitraire dans l'intervalle $[0, 1]$.

Preuve du Corollaire 3.2.1

Lorsque $0 < \alpha < 1$ (resp. $\alpha = 1$), on remplace en (3.10) (resp. (3.12)) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (3.11) (resp. (3.13)) pour obtenir le résultat du Corollaire.

Preuve du Corollaire 3.2.2

Lorsque $0 < \alpha < 1$ (resp. $1 \leq \alpha < 2$), en utilisant (3.10) (resp. (3.12)) et les relations suivantes

$$\begin{aligned} \text{EQM}(L_n^{\text{trap}}(g)) &= \text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g)) = z^2 \text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}), \\ \text{EQM}(L(g)) &= \text{Var}(L(g)) = z^2 \text{Var}(\hat{\beta}) = z^2 s^{-2}, \end{aligned}$$

on obtient (3.14) (resp. (3.15)).

Preuve du Corollaire 3.2.3

Lorsque $0 < \alpha < 1$ (resp. $\alpha = 1$), on remplace en (3.14) (resp. (3.15)) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (3.11) (resp. (3.13)).

Preuve du Corollaire 3.3.1

Le raisonnement est identique au Corollaire 3.2.2.

Preuve du Théorème 3.3.1

Le raisonnement est identique au Théorème 3.2.1.

Preuves des Corollaires 3.3.2 et 3.3.3

Le raisonnement est identique aux Corollaires 3.2.1 et 3.2.3.

3.7.2 Preuve du Théorème 3.5.1

La preuve se fait selon les deux étapes suivants :

- (i) $\sup \{ \Psi_\varphi(h^*) \mid \varphi \in \Lambda_1 \} = \epsilon$
- (ii) $\forall h, \exists \varphi \in \Lambda_1 : \Psi_\varphi(h) \geq \epsilon$

(i) suit par une application directe de l'inégalité de Hölder de paramètres $p_\alpha = (\alpha + 2)/2, q_\alpha = (\alpha + 2)/\alpha$ avec $0 < \alpha \leq 1$

$$\begin{aligned} \Psi_\varphi(h^*) &= \left\{ \int_0^1 (\varphi(t))^{\frac{2}{\alpha+2}} (1_{[0,1]})^{\frac{\alpha}{\alpha+2}} dt \right\}^{\alpha+2} \\ &\leq \left(\int_0^1 1 dt \right)^\alpha \left(\int_0^1 \varphi(t) dt \right)^2 \leq \epsilon, \end{aligned} \tag{3.53}$$

avec l'égalité pour la fonction

$$\varphi(t) = \sqrt{\epsilon}.$$

(ii) Soit h désigne une densité positive arbitraire dans l'intervalle $[0, 1]$. Pour la fonction de régression $f_*(t)$ suivante

$$f_*(t) = 1 - t^{1+\alpha}/(1 + \alpha) - (1 - t)^{1+\alpha}/(1 + \alpha), \quad t \in [0, 1]$$

et pour un processus d'erreur stationnaire dont la fonction d'autocovariance est donnée par

$$R(t-s) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} (1 - |t-s|^\alpha), \quad t, s \in [0, 1],$$

alors, on peut montrer que f_* vérifie l'hypothèse (H3) pour la fonction $\varphi_*(t) = \sqrt{\epsilon}$. Il s'ensuit que $\varphi_* \in \Lambda_1$ et

$$\Psi_{\varphi_*}(h) = \epsilon \int_0^1 h^{-(1+\alpha)}(t) dt \geq \epsilon.$$

En effet, l'inégalité de Hölder de paramètres $p_\alpha = \alpha+2, q_\alpha = (\alpha+2)/(\alpha+1)$ avec $0 < \alpha \leq 1$ donne

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^1 (h^{-(1+\alpha)}(t))^{\frac{1}{\alpha+2}} (h(t))^{\frac{\alpha+1}{\alpha+2}} dt \\ &\leq \left(\int_0^1 h^{-(1+\alpha)}(t) dt \right)^{\frac{1}{\alpha+2}} \left(\int_0^1 h(t) dt \right)^{\frac{\alpha+1}{\alpha+2}} \\ &= \left(\int_0^1 h^{-(1+\alpha)}(t) dt \right)^{\frac{1}{\alpha+2}}. \end{aligned}$$

Ceci prouve (ii) et complète la preuve du Théorème 3.5.1.

3.7.3 Preuve du Théorème 3.6.1

Preuve du Lemme 3.6.1

On pose pour $0 < \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} a'_n(\alpha) &= n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\mathbf{S}^{-1} \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) \mathbf{S}^{-1} \right) - \psi(\mathbf{S}^{-1}) \right) \\ &= n^{1+\alpha} \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \right), \end{aligned} \quad (3.54)$$

en gardant les mêmes notations qu'au chapitre 2, à savoir

$$\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = (v_{ij})_{q \times q}, \quad \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} = (E_{ij})_{q \times q}.$$

On peut parallèlement écrire $a'_n(\alpha)$ sous la forme suivante

$$a'_n(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^{1+\alpha} E_{ij}) v_{ji}.$$

Calcul de $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij}$, pour $0 < \alpha < 1$ et $1 \leq \alpha < 2$:

Comme $\mathbf{S} = (s_{ij})_{q \times q}$ et $\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) = (l_{ij})_{q \times q}$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} E_{ij} &= l_{ij} - s_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, q \\ &= \frac{1}{4n^2} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} \left\{ u_i(t_k)u_j(t_l)R(t_k - t_l) + u_i(t_k)u_j(t_{l+1})R(t_k - t_{l+1}) \right. \\ &\quad \left. + u_i(t_{k+1})u_j(t_l)R(t_{k+1} - t_l) + u_i(t_{k+1})u_j(t_{l+1})R(t_{k+1} - t_{l+1}) \right\} \\ &\quad - \int_0^1 \int_0^1 u_i(t)u_j(s)R(t-s)h(t)h(s) dt ds. \end{aligned}$$

En s'inspirant du résultat du Lemme 3.2.1, on obtient lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij} = -\zeta(-\alpha)\lambda_\alpha \int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t)\varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) dt.$$

Lorsque $1 \leq \alpha < 2$, en s'inspirant des résultats asymptotiques de la régression simple du chapitre 2, on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} &= -\frac{1}{12}\gamma_\alpha \int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t)\varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \\ &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) [B_{1,i}(t)(u_j h)(s) + B_{1,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) [B_{2,i}(t)(u_j h)(s) + B_{2,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \\ &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 R(0) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds, \end{aligned}$$

où γ_α est définie par (3.2) et

$$B_{0,i}(t) = \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right)^{(1)}(t), \quad (3.55)$$

$$B_{1,i}(t) = \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right)(t) + \left(\frac{u_i}{h} \right)^{(1)}(t), \quad (3.56)$$

$$B_{2,i}(t) = \left(\frac{u_i}{h} \right)(t), \quad (3.57)$$

avec $u_i(t) = (\varphi_i/h)(t)$.

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} = -\frac{1}{12}\gamma_\alpha \int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t)\varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt + Q_{2,ij}, \quad (3.58)$$

où

$$\begin{aligned}
 Q_{2,ij} &= \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left[R^{(1)}(s) \left(\frac{u_i}{h} \right) (0) - R^{(1)}(s-1) \left(\frac{u_i}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(s) \right) ds \\
 &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left[R(s) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) - R(s-1) \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_j h)(s) \right) ds \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left[R^{(1)}(t) \left(\frac{u_j}{h} \right) (0) - R^{(1)}(t-1) \left(\frac{u_j}{h} \right) (1) \right] (u_i h)(t) \right) dt \\
 &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \left(\left[R(t) \left(\frac{u_j^{(1)}}{h} \right) (0) - R(t-1) \left(\frac{u_j^{(1)}}{h} \right) (1) \right] (u_i h)(t) \right) dt \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 (u_j h)(s) ds \left(\left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_i^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0) \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 (u_i h)(t) dt \left(\left(\frac{u_j^{(1)}}{h} \right) (1) - \left(\frac{u_j^{(1)}}{h} \right) (0) \right) R(0),
 \end{aligned}$$

et par conséquent, lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} a'_n(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij} \right) v_{ji} \\
 &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) v_{ji} dt,
 \end{aligned}$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} a'_n(1) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} \right) v_{ji} \\
 &= -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(t-s) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\
 &\quad - \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(1)}(t-s) [B_{1,i}(t)(u_j h)(s) + B_{1,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(2)}(t-s) [B_{2,i}(t)(u_j h)(s) + B_{2,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\
 &\quad + \frac{1}{12} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(0) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds.
 \end{aligned}$$

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a'_n(1) = -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q Q_{2,ij} v_{ji}. \quad (3.59)$$

Par symétrie, on peut simplifier cette expression pour obtenir le résultat du Lemme 3.6.1.

Preuve du Lemme 3.6.2

On pose pour $0 < \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} b'_n(\alpha) &= n^{1+\alpha} \left(\psi(\mathbf{S}^{-1}) - \psi(\mathbf{S}^{-1} \mathbf{S}_n^* \mathbf{S}^{-1}) \right) \\ &= n^{1+\alpha} \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \right). \end{aligned} \quad (3.60)$$

On peut écrire $b'_n(\alpha)$ sous la forme suivante

$$b'_n(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^{1+\alpha} \lambda_{ij}) v_{ji},$$

où $(\lambda_{ij})_{i,j}$ étant les éléments de la matrice $\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*$.

Calcul de $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij}$, pour $0 < \alpha < 1$ et $1 \leq \alpha < 2$:

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} &= s_{ij} - s_{ij}^*, \quad i, j = 1, \dots, q \\ &= \int_0^1 \int_0^1 u_i(t) u_j(s) R(t-s) h(t) h(s) dt ds \\ &\quad - \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \int_0^1 [u_i(t_k) R(t_k - s) + u_i(t_{k+1}) R(t_{k+1} - s)] (u_j h)(s) ds. \end{aligned}$$

Lorsque $0 < \alpha < 1$, le résultat du lemme 3.2.2 donne

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} = 0,$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$, en s'inspirant des résultats asymptotiques pour le cas de la régression simple, on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 R(t-s) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 R^{(1)}(t-s) [B_{1,i}(t)(u_j h)(s) + B_{1,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \end{aligned}$$

CHAPITRE 3 : *Extensions aux processus stationnaires de Hölder*

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 R^{(2)}(t-s) [B_{2,i}(t)(u_j h)(s) + B_{2,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds \\ & -\frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 R(0) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] dt ds, \end{aligned}$$

où $B_{0,i}(t)$, $B_{1,i}(t)$, $B_{2,i}(t)$ sont définies par (3.55), (3.56) et (3.57).

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} = \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt - \frac{1}{2} Q_{2,ij}, \quad (3.61)$$

où $Q_{2,ij}$ est définie en (3.58).

Par conséquent, lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b'_n(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} \right) v_{ji} = 0,$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} b'_n(1) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} \right) v_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(t-s) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(1)}(t-s) [B_{1,i}(t)(u_j h)(s) + B_{1,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(2)}(t-s) [B_{2,i}(t)(u_j h)(s) + B_{2,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(0) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] v_{ji} dt ds. \end{aligned}$$

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b'_n(1) = \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) v_{ji} dt - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q Q_{2,ij} v_{ji}. \quad (3.62)$$

De même, par symétrie, on peut simplifier cette expression pour obtenir le résultat du Lemme 3.6.2.

Preuve du Théorème 3.6.1

D'après les propriétés de la trace utilisées en (2.24), on peut aussi écrire pour $0 < \alpha < 2$;

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}) \right) \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} (a'_n(\alpha) + 2b'_n(\alpha)), \end{aligned} \quad (3.63)$$

où $a'_n(\alpha)$ et $b'_n(\alpha)$ sont définis en (3.54) et (3.60).

Selon les résultats des deux lemmes 3.6.1, 3.6.2, on obtient lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} a'_n(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij} \right) v_{ji} \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) v_{ji} dt, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} b'_n(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} \right) v_{ji} = 0, \end{aligned}$$

et par conséquent,

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}) \right) \right) \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) dt \right) v_{ji} \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^{1+\alpha}(t)} \left(\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \varphi_j(t) v_{ji} \varphi_i(t) \right) dt \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^{1+\alpha}(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt, \end{aligned}$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$, en utilisant (3.59) et (3.62), on obtient

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi \left(\text{Var}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) \right) - \psi(\text{Var}(\hat{\beta})) \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} (a'_n(1) + 2b'_n(1)) \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt \right) v_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^2(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt. \end{aligned}$$

Lorsque $0 < \alpha \leq 1$, pour montrer que le plan d'échantillonnage T_n^* est engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.25), on utilise les mêmes arguments que pour le cas simple en remplaçant $\varphi^2(t)$ par $v(t) = \varphi'(t) (S^{-1}MS^{-1}) \varphi(t)$.

Preuve du Corollaire 3.6.1

Lorsque $0 < \alpha < 1$ (resp. $\alpha = 1$), on remplace en (3.24) (resp. (3.26)) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (3.25) (resp. (3.27)).

3.7.4 Preuve du Théorème 3.6.2

Preuve du Lemme 3.6.3

On pose pour $0 < \alpha < 2$,

$$\tau_n'(\alpha) = n^{1+\alpha} \text{trace} \left(\left(\text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} \right) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right), \quad (3.64)$$

avec

$$\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}, \quad \text{Var}(\mathbf{L}_{n,q}(X)) - \mathbf{S} = (E_{ij})_{q \times q}.$$

On peut écrire $\tau_n'(\alpha)$ sous la forme suivante

$$\tau_n'(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^{1+\alpha} E_{ij}) \gamma_{ji}.$$

Lorsque $0 < \alpha < 1$, d'après la preuve du Lemme 3.6.1, on a

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n'(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) \gamma_{ji} dt, \end{aligned}$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$, en utilisant (3.59), on obtient

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n'(1) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 E_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= -\frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) \gamma_{ji} dt + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q Q_{2,ij} \gamma_{ji}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

De même, le résultat du Lemme 3.6.3 s'obtient par simplification de cette expression.

Preuve du Lemme 3.6.4

On pose pour $0 < \alpha < 2$,

$$\theta'_n(\alpha) = n^{1+\alpha} \text{trace} \left((\mathbf{S} - \mathbf{S}_n^*) \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} \right), \quad (3.66)$$

avec

$$\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1} = (\gamma_{ij})_{q \times q}, \quad \mathbf{S} - \mathbf{S}_n^* = (\lambda_{ij})_{q \times q}.$$

On peut écrire $\theta'_n(\alpha)$ sous la forme suivante

$$\theta'_n(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q (n^{1+\alpha} \lambda_{ij}) \gamma_{ji}.$$

En utilisant le résultat du lemme 3.2.2, on obtient lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} = 0,$$

et par conséquent

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \theta'_n(\alpha) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} \right) \gamma_{ji} = 0,$$

et lorsque $1 \leq \alpha < 2$, en utilisant (3.62), on obtient

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \theta'_n(1) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \lambda_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) \gamma_{ji} dt \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(t-s) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] \gamma_{ji} dt ds \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(1)}(t-s) [B_{1,i}(t)(u_j h)(s) + B_{1,j}(s)(u_i h)(t)] \gamma_{ji} dt ds \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R^{(2)}(t-s) [B_{2,i}(t)(u_j h)(s) + B_{2,j}(s)(u_i h)(t)] \gamma_{ji} dt ds \\ &\quad - \frac{1}{24} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q R(0) [B_{0,i}(t)(u_j h)(s) + B_{0,j}(s)(u_i h)(t)] \gamma_{ji} dt ds. \end{aligned}$$

De même, l'intégration par parties permet d'écrire :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \theta'_n(1) = \frac{1}{12} \gamma_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) \gamma_{ji} dt - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q Q_{2,ij} \gamma_{ji}. \quad (3.67)$$

Par symétrie, on peut simplifier cette expression pour obtenir le résultat du Lemme 3.6.4.

Preuve du Théorème 3.6.2

D'après les propriétés de la trace utilisées en (2.27), on peut aussi écrire pour $0 < \alpha < 2$;

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\ &= \text{trace}(\mathbf{M}) \lim_{n \rightarrow \infty} (\tau'_n(\alpha) + 2\theta'_n(\alpha)), \end{aligned} \quad (3.68)$$

où $\tau'_n(\alpha)$ et $\theta'_n(\alpha)$ sont définis en (3.64) et (3.66).

Selon les résultats des deux lemmes 3.6.1, 3.6.2, on obtient lorsque $0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \tau'_n(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} E_{ij} \right) \gamma_{ji} \\ &= -\zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) \gamma_{ji} dt, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \theta'_n(\alpha) &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \lambda_{ij} \right) \gamma_{ji} = 0. \end{aligned}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{1+\alpha} \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\ &= -\text{trace}(\mathbf{M}) \zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^{1+\alpha}(t)} \right) dt \right) \gamma_{ji} \\ &= -\text{trace}(\mathbf{M}) \zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^{1+\alpha}(t)} \left(\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \varphi_j(t) \gamma_{ji} \varphi_i(t) \right) dt \\ &= -\text{trace}(\mathbf{M}) \zeta(-\alpha) \lambda_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^{1+\alpha}(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt. \end{aligned}$$

Si $1 \leq \alpha < 2$, en utilisant (3.65) et (3.67), on obtient

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \left(\psi(\text{Var}(L_n^{\text{trap}}(g))) - \psi(\text{Var}(L(g))) \right) \\ &= \text{trace}(\mathbf{M}) \lim_{n \rightarrow \infty} (\tau'_n(1) + 2\theta'_n(1)) \\ &= \frac{1}{12} \text{trace}(\mathbf{M}) \gamma_\alpha \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \left(\int_0^1 \left(\frac{\varphi_i(t) \varphi_j(t)}{h^2(t)} \right) dt \right) \gamma_{ji} \\ &= \frac{1}{12} \text{trace}(\mathbf{M}) \gamma_\alpha \int_0^1 \frac{1}{h^2(t)} \boldsymbol{\varphi}'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \boldsymbol{\varphi}(t) dt. \end{aligned}$$

CHAPITRE 3 : *Extensions aux processus stationnaires de Hölder*

Pour $0 < \alpha \leq 1$, en procédant de la même manière que le Théorème 3.6.1 avec $v(t) = \varphi'(t) (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}^{-1}) \varphi(t)$ on montre que la constante asymptotique est minimisée en prenant un plan d'échantillonnage engendré par la densité $h^*(t)$ définie par (3.29), ce qui achève la preuve du Théorème 3.6.2.

Preuve du Corollaire 3.6.2

Lorsque $0 < \alpha < 1$ (resp. $\alpha = 1$), on remplace en (3.28) (resp. (3.30)) $h(t)$ par $h^*(t)$ définie par (3.29) (resp. (3.31)).

Chapitre 4

Application à la pharmacocinétique

4.1 Modèle de concentration

Pour une fonction de concentration g défini dans un intervalle d'observation $[t_{n,0}, t_{n,n}]$, on considère le modèle :

$$X(t_{n,k}) = g(t_{n,k}) + \varepsilon(t_{n,k}) \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

où $\{t_{n,0}, t_{n,1}, \dots, t_{n,n}\}$ sont les instants d'observation de X dans l'intervalle $[t_{n,0}, t_{n,n}]$ et les erreurs $\varepsilon(t_{n,k})$ forment un processus aléatoire centré et auto-corrélé. On fixe les points $t_{n,0} = 0$ et $t_{n,n} = 96$, et on s'intéresse au choix optimal des points intermédiaires $\{t_{n,1}, \dots, t_{n,n-1}\}$ pour l'estimation de l'intégrale (AUC) suivante :

$$\text{AUC}(g) = \int_0^{96} g(t) dt.$$

En utilisant les points de quadrature $\{t_{n,1}, \dots, t_{n,n-1}\}$, l'approximation des Trapèzes de $\text{AUC}(g)$ est définie par :

$$L_n(X) = \frac{1}{2} \left\{ X(t_{n,0})(t_{n,1} - t_{n,0}) + \sum_{i=1}^{n-1} X(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1}) + X(t_{n,n})(t_{n,n} - t_{n,n-1}) \right\}.$$

Le but est de sélectionner via un algorithme approprié les temps d'observations $\{t_{n,1}^*, \dots, t_{n,n-1}^*\}$ qui minimisent l'erreur quadratique moyenne

$$\text{EQM}(L_n(X)) = \mathbb{E}(L_n(X) - \text{AUC}(g))^2.$$

On considère le modèle tri-exponentiel représentant la concentration dans le plasma (ng/ml) de la digoxine après absorption du médicament, sachant que le temps est mesuré en heures.

$$g(t) = A \exp(-\lambda_1 t) + B \exp(-\lambda_2 t) + C \exp(-\lambda_3 t),$$

Katz et d'Argenio (1983) et Piegorsch et Bailer (1989) ont fixé les valeurs des paramètres suivants :

- $A = -2.4$, $\lambda_1 = 10.0$, $B = 2.0$, $\lambda_2 = 0.65$, $C = 0.4$ et $\lambda_3 = 0.0146$.
- Le nombre d'observations est fixé et égal à 13.
- Les observations initiales et finales sont fixées respectivement à 0 et 96, c'est à dire que : $t_{n,0} = 0$, $t_{n,12} = 96$ et $t_{n,1}, t_{n,2}, \dots, t_{n,11}$ sont les instants intermediaires convenablement choisis par une procédure appropriée.
- La valeur exacte de l'intégrale est

$$\text{AUC}(g) = \int_{t_{n,0}}^{t_{n,12}} g(t) dt = 23.4889.$$

- La fonction de l'écart type correspondant aux erreurs de mesure est choisie sous la forme suivante :

$$\sigma(t_{n,i}) = 0.05 + 0.1g(t_{n,i}), \quad i = 0, 1, \dots, 12.$$

Le modèle hétéroscédastique dans lequel l'écart type du bruit dépend de la fonction de régression a été considéré, par exemple, par Galtchouk et Pergamshchikov (2009).

L'échantillon conventionnel (partiellement périodique) choisi par Wagner et Ayres (1977) est le suivant :

$$\{0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.5, 3, 5, 12, 24, 48, 72, 96\}.$$

4.2 Fonction objective

La fonction objective J représente l'erreur quadratique d'approximation de $\text{AUC}(g)$ par $L_n(X)$:

$$J = E(L_n(X) - \text{AUC}(g))^2.$$

Pour celà, on définit les quantités suivantes utiles pour l'optimisation algorithmique de la fonction objective J :

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2} \left\{ g(t_{n,0})(t_{n,1} - t_{n,0}) + \sum_{i=1}^{n-1} g(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1}) + g(t_{n,n})(t_{n,n} - t_{n,n-1}) \right\} - \text{AUC}(g) \\ &= L_n(g) - \text{AUC}(g) \\ P &= \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon(t_{n,0})(t_{n,1} - t_{n,0}) + \sum_{i=1}^{n-1} \varepsilon(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1}) + \varepsilon(t_{n,n})(t_{n,n} - t_{n,n-1}) \right\} \\ &= L_n(\varepsilon) \\ R^2 &= E(P^2). \end{aligned}$$

Alors la fonction objective J se décompose de la façon suivante :

$$J = R^2 + Q^2.$$

CHAPITRE 4 : Application à la pharmacocinétique

La composante R^2 représente le terme lié aux erreurs d'observations et la composante Q^2 représente numériquement l'erreur d'approximation de l'intégrale par l'estimateur des Trapèzes.

Il s'ensuit que :

$$\begin{aligned} J &= E(L_n(X) - \text{AUC}(g))^2 = E(P + Q)^2 \\ &= E(P^2) + Q^2 + 2QE(P). \end{aligned}$$

Comme les erreurs sont supposées centrées $E(\varepsilon(t_{n,i})) = 0, \forall i = 0, 1, \dots, n$, alors $E(P) = 0$ et donc $J = R^2 + Q^2$.

On peut calculer le terme R^2 de la fonction objective J de la façon suivante :

$$\begin{aligned} R^2 &= E(P^2) \\ &= \frac{1}{4} \left\{ E(\varepsilon^2(t_{n,0}))(t_{n,1} - t_{n,0})^2 + \sum_{i=1}^{n-1} E(\varepsilon^2(t_{n,i}))(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})^2 \right. \\ &\quad + E(\varepsilon^2(t_{n,n}))(t_{n,n} - t_{n,n-1})^2 + 2(t_{n,1} - t_{n,0}) \sum_{i=1}^{n-1} E(\varepsilon(t_{n,0})\varepsilon(t_{n,i}))(t_{n,i+1} - t_{n,i-1}) \\ &\quad + 2(t_{n,1} - t_{n,0})(t_{n,n} - t_{n,n-1})E(\varepsilon(t_{n,0})\varepsilon(t_{n,n})) \\ &\quad + 2(t_{n,n} - t_{n,n-1}) \sum_{i=1}^{n-1} E(\varepsilon(t_{n,n})\varepsilon(t_{n,i}))(t_{n,i+1} - t_{n,i-1}) \\ &\quad \left. + 2 \sum_{i=2}^{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} E(\varepsilon(t_{n,i})\varepsilon(t_{n,j}))(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})(t_{n,j+1} - t_{n,j-1}) \right\}. \end{aligned}$$

Lorsque les erreurs ne sont pas corrélées, c'est à dire que

$$E(\varepsilon(t_{n,i})\varepsilon(t_{n,j})) = \begin{cases} \sigma^2(t_{n,i}) & i = j \\ 0 & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i \neq j. \end{cases}$$

Alors

$$R^2 = \frac{1}{4} \left\{ \sigma^2(t_{n,0})(t_{n,1} - t_{n,0})^2 + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma^2(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})^2 + \sigma^2(t_{n,n})(t_{n,n} - t_{n,n-1})^2 \right\} \quad (4.1)$$

Lorsque les erreurs sont corrélées de fonction d'autocovariance définie par

$$\text{cov}(\varepsilon(t_{n,i}), \varepsilon(t_{n,j})) = E(\varepsilon(t_{n,i})\varepsilon(t_{n,j})) = \begin{cases} \sigma^2(t_{n,i}) & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i = j \\ \sigma(t_{n,i})\sigma(t_{n,j})\rho(t_{n,i}, t_{n,j}) & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i \neq j, \end{cases}$$

où $\rho(t_{n,i}, t_{n,j})$ correspond à la fonction d'autocovariance pour des erreurs de

variance égale à 1, alors on obtient

$$\begin{aligned}
 R^2 &= E(P^2) \\
 &= \frac{1}{4} \left\{ \sigma^2(t_{n,0})(t_{n,1} - t_{n,0})^2 + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma^2(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})^2 + \sigma^2(t_{n,n})(t_{n,n} - t_{n,n-1})^2 \right. \\
 &\quad + 2(t_{n,1} - t_{n,0})\sigma(t_{n,0}) \sum_{i=1}^{n-1} \sigma(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})\rho(t_{n,0}, t_{n,i}) \\
 &\quad + 2(t_{n,1} - t_{n,0})(t_{n,n} - t_{n,n-1})\sigma(t_{n,0})\sigma(t_{n,n})\rho(t_{n,0}, t_{n,n}) \\
 &\quad + 2(t_{n,n} - t_{n,n-1})\sigma(t_{n,n}) \sum_{i=1}^{n-1} \sigma(t_{n,i})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})\rho(t_{n,n}, t_{n,i}) \\
 &\quad \left. + 2 \sum_{i=2}^{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma(t_{n,i})\sigma(t_{n,j})\rho(t_{n,i}, t_{n,j})(t_{n,i+1} - t_{n,i-1})(t_{n,j+1} - t_{n,j-1}) \right\}.
 \end{aligned}$$

4.3 Plans d'expérience optimaux

L'échantillonnage optimal dépend de la nature des erreurs de mesure. On distinguera plusieurs possibilités sur le processus d'erreur.

4.3.1 Erreurs non corrélées avec variance constante

On suppose que les erreurs $\varepsilon(t_{n,i})$ sont non corrélées et de variance $\sigma^2(t_{n,i})$ constante, c'est à dire que :

$$E(\varepsilon(t_{n,i})\varepsilon(t_{n,j})) = \begin{cases} \sigma^2(t_i) = \text{constant} = \sigma^2 & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i = j \\ 0 & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i \neq j. \end{cases}$$

Dans ce cas, (4.1) s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 R^2 &= E(P^2) \\
 &= \frac{1}{4} \sigma^2 \left\{ (t_{n,1} - t_{n,0})^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (t_{n,i+1} - t_{n,i-1})^2 + (t_{n,n} - t_{n,n-1})^2 \right\}.
 \end{aligned}$$

On peut montrer que les points optimaux $\{t_{n,i}^*, i = 1, \dots, n-1\}$ sont donnés par :

Si $n-1$ est pair,

$$t_{n,i}^* = \left\{ \frac{\left[\frac{1}{2}(i+1) \right]}{\frac{n-1}{2} + 1} \right\} (t_{n,n} - t_{n,0}) + t_{n,0},$$

où $[x]$ est la partie entière de x , et si $n-1$ est impair,

$$t_{n,i}^* = \begin{cases} \left(\frac{i+1}{n+2}\right)(t_{n,n} - t_{n,0}) + t_{n,0} & \text{pour } i \text{ impair,} \\ \left(\frac{i}{n}\right)(t_{n,n} - t_{n,0}) + t_{n,0} & \text{pour } i \text{ pair.} \end{cases}$$

Cela correspond à un plan d'expérience optimal qui consiste à choisir des couples de points équidistants.

4.3.2 Erreurs non corrélées avec variance non constante

On suppose que les erreurs $\varepsilon(t_{n,i})$ sont non corrélées et de variance $\sigma^2(t_{n,i})$, c'est à dire que :

$$E(\varepsilon(t_i)\varepsilon(t_j)) = \begin{cases} \sigma^2(t_{n,i}) & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i = j \\ 0 & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i \neq j, \end{cases}$$

où la variance $\sigma^2(t_{n,i})$ est définie par le modèle hétéroscédastique :

$$\sigma(t_{n,i}) = 0.05 + 0.1g(t_{n,i}), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Dans ce qui suit, on donne les conditions d'optimalité puis l'idée de la méthode de Descente de Gradient et ensuite on intègre cet algorithme à notre exemple. Ensuite, on présente le plan d'expérience optimal selon l'algorithme Descente de Gradient et le plan d'expérience selon la méthode conventionnelle et on compare les performances de ces deux méthodes.

Conditions d'optimalité

On rappelle ici les conditions d'optimalité d'une application définie dans \mathbb{R}^n . (voir par exemple Petit (2007))

1. Notions fondamentales et définitions

On se place dans $\mathbb{R}^n, n < \infty$, considéré comme un espace vectoriel normé muni de la norme euclidienne notée $\|\cdot\|$. On considère des fonctions différentiables ou deux fois différentiables $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$. On note Ω un ouvert de \mathbb{R}^n .

Définition 1. Soit l'application $\mathbb{R}^n \supset \Omega \ni x \mapsto g(x) \in \mathbb{R}$. On dit que g présente en $x^* \in \Omega$ un minimum (optimum) local, si et seulement s'il existe un voisinage V de x^* tel que ; $\forall x \in V \cap \Omega, \quad g(x^*) \leq g(x)$ (on dit que c'est un minimum strict si la précédente inégalité est stricte). On dit que x est solution locale du problème :

$$\min_{x \in \Omega} (g(x))$$

Définition 2. On dit que $x^* \in \Omega$ est un minimum (optimum) global de la fonction $\mathbb{R}^n \supset \Omega \ni x \mapsto g(x) \in \mathbb{R}$ si $\forall x \in \Omega$ on a $g(x^*) \leq g(x)$.

CHAPITRE 4 : Application à la pharmacocinétique

On dit que c'est un minimum strict global si la précédente inégalité est stricte. On dit que x^* est solution globale du problème

$$\min_{x \in \Omega} (g(x))$$

Définition 3. On note

$$(\nabla g(x))^T = \frac{\partial g}{\partial x}(x) = \left(\frac{\partial g}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial g}{\partial x_n} \right)(x)$$

le gradient de g où $x^T = (x_1, \dots, x_n)$.

Définition 4. On appelle Hessian de g la matrice symétrique de $M_n(\mathbb{R})$

$$\nabla^2 g(x) = \left(\frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \right)(x), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Définition 5. On dit que x^* est un point stationnaire (critique) de g si

$$\nabla g(x^*) = 0.$$

2. **Existence d'un minimum.** Le Théorème de Weierstrass suivant garantit l'existence d'une solution au problème de recherche de minimum.

Si g est une fonction réelle continue sur un compact $K \subset \mathbb{R}^n$ alors le problème de recherche de minimum global

$$\min_{x \in K} (g(x))$$

possède une solution $x^* \in K$.

3. **Conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité sur un ouvert.**

Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^n . Une condition nécessaire et suffisante pour que x^* soit un optimum local de $\mathbb{R}^n \ni x \mapsto g(x) \in \mathbb{R}$, fonction deux fois différentiable, est

$$\{ \nabla g(x^*) = 0, \quad \nabla^2 g(x^*) \geq 0 \}.$$

4. **Importance de la convexité.**

Définition 6. E ensemble de \mathbb{R}^n est convexe si

$$\forall (x, y) \in E \times E, \quad \forall \lambda \in [0, 1] \text{ alors } \lambda x + (1 - \lambda)y \in E.$$

Définition 7. soit E convexe de \mathbb{R}^n . On dit que l'application

$E \ni x \mapsto g(x) \in \mathbb{R}$ est convexe si $\forall (x, y) \in E \times E, \quad \forall \lambda \in [0, 1]$ on a

$$g(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda g(x) + (1 - \lambda)g(y).$$

Théorème 1. Soit E convexe de \mathbb{R}^n et $E \ni x \mapsto g(x) \in \mathbb{R}$ application deux fois différentiable. Les propositions suivantes sont équivalentes :

- (a) g est convexe.
- (b) $\forall (x, y) \in E^2, g(y) \geq g(x) + (\nabla g(x))^T (y - x)$.
- (c) $\forall x \in E, \nabla^2 g(x) \geq 0$.

Théorème 2. Pour une application convexe définie sur un ensemble convexe, tout minimum local est global.

Théorème 3. Soit g une fonction convexe deux fois différentiable. Une condition nécessaire et suffisante pour que $x^* \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ avec Ω convexe soit un optimum global est que

$$\nabla g(x^*) = 0.$$

4.3.2.1 Principe de la méthode de Descente de Gradient

Dans cette partie, on donne l'idée intuitive de la méthode de Descente de Gradient (voir par exemple Iouditski (2012) et la mémoire de thèse de Tertois (2003)) pour étudier le problème de minimisation suivante :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} g(x). \tag{4.2}$$

Nous faisons maintenant une fois pour toutes l'hypothèse suivante :

- La fonction objective g dans (4.2) est continûment différentiable ;
- le problème en question est soluble : l'ensemble

$$X^* = \underset{\mathbb{R}^n}{\text{Argmin}} g$$

est non vide.

L'algorithme d'optimisation le plus simple est la Descente de Gradient, dont le principe est de partir d'un point aléatoire puis de se déplacer dans la direction de la plus forte pente. En appliquant un certain nombre d'itérations, l'algorithme converge vers une solution qui est généralement un minimum local de $g(x)$. Le graphe suivant qui nous donne une idée sur cette méthode pour la fonction $g(x) = x^2 + 1$ est représenté par la figure 4.1. L'idée de la méthode est simple. Supposons que nous sommes en un certain point x , et que nous avons calculé $g(x)$ et $\nabla g(x)$. Supposons aussi que x n'est pas un point critique de g : $\nabla g(x) \neq 0$. Alors $g_1 = -\nabla g(x)$ est une direction de descente de g en x :

$$\frac{d}{d\gamma} \Big|_{\gamma=0} g(x - \gamma \nabla g(x)) = -|\nabla g(x)|^2 < 0.$$

De plus, c'est la meilleure parmi les directions h de descente (normalisées pour avoir la même longueur que celle de g_1) de g en x : pour tout h , $|h| = |g_1|$ on a

$$\frac{d}{d\gamma} \Big|_{\gamma=0} g(x + \gamma h) = h^T \nabla g(x) \geq -|h| |\nabla g(x)| = -|\nabla g(x)|^2$$

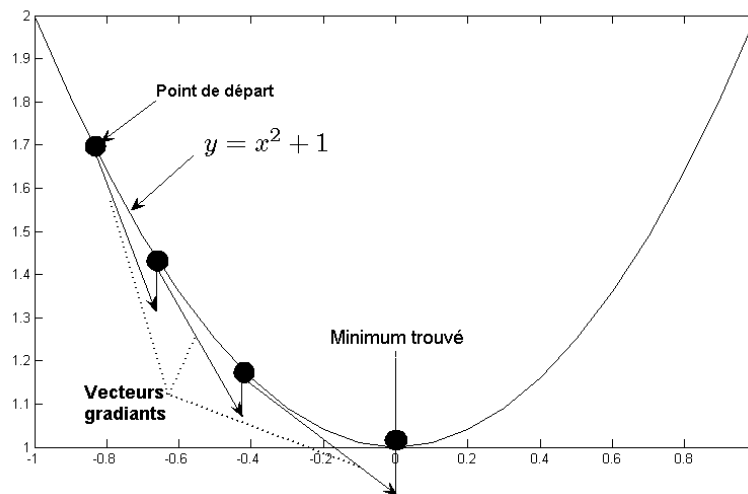


FIG. 4.1 – Descente de gradient

(par l'inégalité de Cauchy, qui devient égalité si et seulement si $h = g_1$).

L'observation indiquée démontre qu'afin d'améliorer x pour former un nouveau point avec une plus petite valeur de l'objectif on a peur d'effectuer un déplacement (pas)

$$x \mapsto x + \gamma g_1 = x - \gamma \nabla g(x)$$

à partir de x dans la direction de l'antigradient ; un tel déplacement avec la longueur de pas $\gamma > 0$ correctement choisi assure la décroissance de g . La méthode de Descente de Gradient consiste, tout simplement, de réitérer ce pas. Ainsi, le schéma générique de la méthode est défini dans la partie suivante.

Algorithme Descente de Gradient

Initialisation : choisir le point initial x_0 et mettre $t = 1$.

étape t : au début de l'étape t nous avons la précédente itération x_{t-1}

- On calcule $g(x_{t-1})$ et $\nabla g(x_{t-1})$.
- On choisit (d'une façon ou d'une autre) un pas positif γ_t et on pose

$$x_t = x_{t-1} - \gamma_t \nabla g(x_{t-1}) \quad (4.3)$$

puis on remplace t par $t + 1$ et on boucle.

Ainsi, la méthode générique de Descente de Gradient est la répétition de (4.3) avec une certaine règle pour choisir les pas $\gamma_t > 0$. Normalement, les pas sont donnés par une sorte de recherche linéaire, appliquée à la

fonction univariée

$$\phi_t(\gamma) = g(x_{t-1} - \gamma \nabla g(x_{t-1})).$$

Implementations standards

Les différentes versions de la recherche linéaire résultent dans différentes versions de la méthode de Descente de Gradient. Parmi ces versions, on devrait mentionner :

- DAR [Descente de Gradient avec la recherche linéaire d'Armijo] : le pas $\gamma_t > 0$ à l'itération t où $\nabla g(x_{t-1}) \neq 0$ est choisi selon le test d'Armijo

$$\begin{aligned} g(x_{t-1} - \gamma_t \nabla g(x_{t-1})) &\leq g(x_{t-1}) - \epsilon \gamma_t |\nabla g(x)|^2; \\ g(x_{t-1} - \eta \gamma_t \nabla g(x_{t-1})) &\geq g(x_{t-1}) - \epsilon \eta \gamma_t |\nabla g(x)|^2, \end{aligned}$$

$\epsilon \in (0, 1)$ et $\eta > 1$ sont des paramètres de la méthode. Si x_{t-1} est un point critique de g , $\nabla g(x_{t-1}) = 0$, le choix de $\gamma_t > 0$ n'a absolument aucune importance : indépendamment de la valeur de γ_t , (4.3) aura comme conséquence $x_t = x_{t-1}$.

- PRD ["Steepest Descent" (la Plus Rapide Descente)] : γ_t minimise g le long du rayon $\{x_{t-1} - \gamma \nabla g(x_{t-1}) \mid \gamma \geq 0\}$:

$$\gamma_t \in \underset{\gamma \geq 0}{\text{Argmin}} g(x_{t-1} - \gamma \nabla g(x_{t-1}))$$

Evidemment, la plus rapide descente est un genre d'idéalisation : dans des cas non triviaux nous ne savons pas trouver un minimum exact de l'objectif le long de ce rayon . D'ailleurs, pour rendre cette idéalisation valide, nous devrions supposer que les pas correspondants sont bien définis, c.-à-d., que

$$\underset{\gamma \geq 0}{\text{Argmin}} g(x - \gamma \nabla g(x)) \neq \phi.$$

4.3.2.2 Plan d'expérience optimal selon l'algorithme Descente de Gradient

Avant de présenter le plan d'expérience optimal obtenu par cet algorithme, on va d'abord déterminer le pas optimal et les points optimaux selon l'Algorithme Descente de Gradient pour cet exemple :

On pose :

$$\begin{aligned} t &= (t_1, t_2, \dots, t_{13}) \text{ où } t_1 = 0, t_{13} = 96 \text{ et } t_2, \dots, t_{12} \text{ variables} \\ t^1 &= \{t_1^1, t_2^1, \dots, t_{13}^1\} \\ &= (0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.5, 3, 5, 12, 24, 48, 72, 96) \\ t_\alpha^2 &= t^1 - \alpha \frac{\partial J}{\partial t}(t^1); \alpha > 0 \\ r(\alpha) &= J(t^1) - 0.8\alpha \left\| \frac{\partial J}{\partial t}(t^1) \right\|^2, \end{aligned}$$

CHAPITRE 4 : Application à la pharmacocinétique

où α désigne le pas de cet algorithme et J représente la fonction objective à minimiser (pour notre exemple J représente l'erreur quadratique moyenne et cette fonction dépend de 11 variables)

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial t} &= \left(\frac{\partial J}{\partial t_i} \right)_{i=1,2,\dots,13} \\ \frac{\partial J}{\partial t_1} &= \frac{\partial J}{\partial t_{13}} = 0 \\ \left\| \frac{\partial J}{\partial t}(t^1) \right\|^2 &= \sum_{i=1}^{13} \left(\frac{\partial J}{\partial t_i}(t^1) \right)^2. \end{aligned}$$

1. On pose $\alpha = 1$;

2. Si

$$r(\alpha) > J(t_\alpha^2), \quad (4.4)$$

alors on prend : $\alpha = (1.1) \alpha$,
et si

$$r(\alpha) < J(t_\alpha^2), \quad (4.5)$$

alors on prend : $\alpha = \frac{\alpha}{1.1}$.

3. On effectue M itérations.

4. (a) Si (4.4) est vérifiée pour les n premières itérations ($n \leq M$) et que (4.5) est vérifiée à la $(n+1)^{\text{ème}}$ itération, alors, on définit le pas optimal de l'algorithme par $\alpha^* = (1.1)^n$.

(b) Par contre, si (4.5) est vérifiée pour les n premières itérations ($n \leq M$) et que (4.4) est vérifiée à la $(n+1)^{\text{ème}}$ itération, alors on définit le pas optimal de l'algorithme par $\alpha^* = (1.1)^{-n}$.

5. Pour les deux cas précédents (4a) et (4b), on pose

$$t_{\alpha^*}^2 = t^1 - \alpha^* \frac{\partial J}{\partial t}(t^1)$$

où $t_{\alpha^*}^2$ est le premier vecteur optimal correspondant au pas optimal α^* .

6. Pour améliorer à travers la valeur de J , le premier vecteur optimal $t_{\alpha^*}^2$, on pose :

$$t^1 = t_{\alpha^*}^2 \quad (4.6)$$

$$t_{\alpha^*}^2 = t^1 - \alpha^* \frac{\partial J}{\partial t}(t^1). \quad (4.7)$$

On applique (4.6) et (4.7) N fois ($N \geq 100$) jusqu'à obtenir le meilleur $t_{\alpha^*}^2(N)$.

Il y a plusieurs critères qui peuvent être définis pour arrêter l'algorithme :

1. On peut se limiter à un certain nombre d'itérations.
2. On peut arrêter lorsque $J(t_\alpha^2)$ atteint un certain seuil minimal.
3. On peut aussi arrêter lorsque le vecteur évolue peu, c'est à dire quand la valeur suivante atteint un seuil minimal.

Après avoir effectué $M = 2000$ itérations avec un temps de calcul de 2 secondes, on a obtenu le pas optimal $\alpha^* = 0.56$ et les points optimaux sont représentés dans le tableau ci-dessous.

4.3.2.3 Comparaison du plan selon l'algorithme Descente de Gradient et du plan conventionnel

Le tableau suivant donne le plan d'échantillonnage optimal selon l'algorithme de descente de gradient (ADG) et le plan d'échantillonnage conventionnelle (PC) ainsi que les valeurs correspondantes de l'erreur quadratique moyenne (fonction objective) $J_l^*(n) = \mathbb{E}(L_n(X) - \text{AUC}(g))^2$ et de l'erreur d'approximation $Q_l^*(n) = \mathbb{E}(L_n(X)) - \text{AUC}(g)$, $l = 1, 2$ (Cf Annexe A1 et A2 réalisés en MATLAB 7.0 pour obtenir les résultats).

Le tableau 4.1 nous informe que quand les erreurs sont non corrélées, ADG fournit de meilleurs résultats car il permet de réduire significativement l'erreur quadratique moyenne de 44% par rapport à PC. Par ailleurs, la valeur de l'erreur d'approximation Q^* correspondante à ADG est la même que celle obtenue par PC. On donne aussi le *CPU* time de ADG.

PC	ADG
0	0
0.25	0.48
0.50	2.38
0.75	6.53
1.0	12.35
1.5	16.58
3.0	25.10
5.0	29.55
12.0	42.38
24.0	46.93
48.0	65.95
72.0	69.46
96.0	96.00
$J_1^*(n) = 8.65$	$J_2^*(n) = 4.83$
$Q_1^*(n) = 0.29$	$Q_2^*(n) = 0.29$
	<i>CPU</i> = 2s

TAB. 4.1 – Points d'échantillonnage optimaux et erreurs quadratiques moyennes $J_l^*(n)$, $l = 1, 2$, $n = 13$ et erreurs d'approximation $Q_l^*(n)$, $l = 1, 2$, pour des erreurs non corrélées.

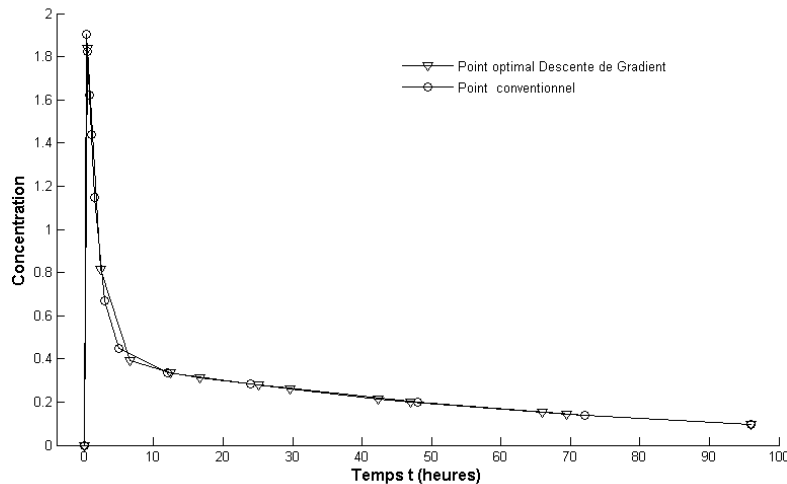


FIG. 4.2 – Points d'échantillonnage optimaux selon ADG et PC lorsque les erreurs sont non corrélées et de variance non constante.

4.3.2.4 Principe de l'algorithme Recuit Simulé

Le nom de cet algorithme ainsi que la plupart des termes utilisés comme température, équilibre statistique et gel du système sont empruntés au domaine de la métallurgie (voir par exemple <http://membres.multimania.fr/juhelp/java/recuit.htm>). En effet, l'état de la matière dépend de la température : à haute température, on a l'état liquide et à basse température, l'état solide.

Si l'on souhaite obtenir un métal avec une structure parfaite de type cristal (c'est l'état fondamental correspondant au minimum d'énergie interne), on va procéder comme suit : après avoir porté la matière à l'état liquide, on va abaisser la température jusqu'à solidification. Si la décroissance de température se fait de façon très brusque, on obtient un 'verre', caractéristique de la technique de 'trempe'. Si par contre elle se fait de façon très progressive, laissant le temps aux atomes d'atteindre l'équilibre statistique, on tendra vers des structures de plus en plus régulières pour finir dans l'état fondamental : le cristal, caractérisant le gel du système.

L'algorithme du recuit simulé (ARS) est une méthode d'optimisation stochastique globale. Recuit simulé tire son nom tel qu'il est un analogue de la conceptuel de refroidissement (recuit) des métaux de haute énergie état fondu en thermodynamique. Le métal recuit atteint l'état minimum global de l'énergie si le

procédé de recuit est très lent, depuis la fluctuation aléatoire de l'énergie du métal lui permet d'échapper des minima locaux. Si le métal est refroidi rapidement, il pourrait ne pas échapper à un minimum local de l'énergie. Comme le processus physique de recuit, l'algorithme du recuit simulé permet l'état actuel de se déplacer vers le haut à partir d'un minimum local avec une certaine probabilité d'acceptation. Cette idée a d'abord été décrit dans un article fondateur de Metropolis et al. (1953). La probabilité d'acceptation de ARS est contrôlée par un paramètre appelé "température" qui tire son nom de l'horaire de température de refroidissement dans le processus physique de recuit. Les lecteurs peuvent trouver d'excellentes critiques de la ARS dans Bohachevsky et al. (1986) et Goffe et al. (1994). Contrairement à la plupart des algorithmes déterministes, puisque ARS déplace à la fois en descente et en montée le long de la surface de la fonction objective, il converge théoriquement vers le minimum global pour les fonctions complexes pour lesquelles il n'existe pas de dérivées, à de nombreux minima locaux ou de grande dimension fonctions discrètes ou continues. Dans de nombreux cas, si il est exécuté d'une manière sensible, la solution de ARS est insensible aux valeurs de départ, ce qui est un problème majeur pour de nombreux algorithmes d'optimisation. L'algorithme peut facilement employer une variété de contraintes et de la mise en œuvre est relativement simple puisque ARS ne nécessite pas de dérivées de la fonction objective. Cependant, ARS n'est pas sans ses inconvénients qui peuvent inclure des temps de fonctionnement longs et assez peu du bricolage avec le calendrier de refroidissement pour obtenir un algorithme raisonnable. Nous avons adopté ARS pour la raison suivante. Notre fonction objective J est compliquée, non-linear, n'a pas des dérivées pour le cas où les erreurs sont corrélées avec une fonction d'autocovariance non dérivable le long de la diagonale et de variance non constante. La description de notre algorithme ARS se présente comme suit (voir Duffull et al. (2002)). On suppose que les observations initiales et finales sont fixées. On initialise la température, $T^{(1)}$, et à partir des observations $t^{(1)} = (t_0^{(1)}, \dots, t_n^{(1)})$. Puis chaque itération $l = 2, \dots, L$ est la suivante :

1. $T^{(l)} = T^{(1)} / \log(l)$;
2. choisir aléatoirement k uniformément de $1, \dots, n - 1$;
3. simuler t_{new} uniformément dans l'intervalle $(t_{k-1}^{(l-1)}, t_{k+1}^{(l-1)})$;
4. poser $t^{(l)} = (t_0^{(l-1)}, \dots, t_{k-1}^{(l-1)}, t_{\text{new}}, t_{k+1}^{(l-1)}, \dots, t_n^{(l-1)})$;
5. calculer $\phi_l = J(t^{(l)})$;
6. poser $p = \min \left\{ \exp\left(-\frac{\Delta\phi}{T^{(l)}}\right), 1 \right\}$ où $\Delta\phi = \phi_l - \phi_{l-1}$;
7. générer $u \sim U[0, 1]$;

8. accepter les observations actuelles $t^{(l)}$ si $u \leq p$; sinon $t^{(l)} = t^{(l-1)}$.

4.3.2.5 Comparaison du plan selon l'algorithme Recuit Simulé et des plans Conventionnel et Uniforme

On applique l'algorithme du recuit simulé (ARS) afin d'obtenir les points d'échantillonnage optimaux basé sur 2000 itérations. Ensuite, on compare ce plan avec le plan d'échantillonnage conventionnelle (PC) et le plan d'échantillonnage uniforme (PU). Les résultats sont résumés dans le tableau 4.2 ci-dessous avec les erreurs quadratiques moyennes correspondantes $J_l^*(n) = \mathbb{E}(L_n(X) - \text{AUC}(g))^2, l = 1, 2, 3$ et les erreurs d'approximation $Q_l^*(n) = \mathbb{E}(L_n(X)) - \text{AUC}(g), l = 1, 2, 3$. La figure 4.3 affiche le plan d'échantillonnage optimal selon ARS. On voit du tableau 4.2 que lorsque les erreurs sont corrélées, ARS donne une meilleure performance que PC et PU puisque son erreur quadratique moyenne $J_{T_n^*}$ avec le plan d'échantillonnage optimal T_n^* et son erreur d'approximation Q_n^* sont beaucoup plus petits. En effet, l'EQM $J_1^*(n)$ correspondant au plan d'échantillonnage optimal selon ARS est 45% plus petit que celui du PC et 79% plus petit que celui du PU (Cf Annexe A1 et A4 réalisés en MATLAB 7.0).

ARS	PC	PU
0.00	0.00	0.00
0.92	0.25	8.00
4.63	0.50	16.00
12.26	0.75	24.00
18.25	1.00	32.00
33.74	1.50	40.00
39.96	3.00	48.00
56.51	5.00	56.00
65.83	12.00	64.00
74.74	24.00	72.00
82.40	48.00	80.00
86.42	72.00	88.00
96.00	96.00	96.00
$J_1^*(n) = 4.72$	$J_2^*(n) = 8.65$	$J_3^*(n) = 22.42$
$Q_1^*(n) = 0.12$	$Q_2^*(n) = 0.29$	$Q_3^*(n) = -4.32$

TAB. 4.2 – Points d'échantillonnage optimaux, erreurs quadratiques moyennes $J_l^*(n), l = 1, 2, 3, n = 13$ et erreurs d'approximation $Q_l^*(n), l = 1, 2, 3$, pour des erreurs non corrélées.

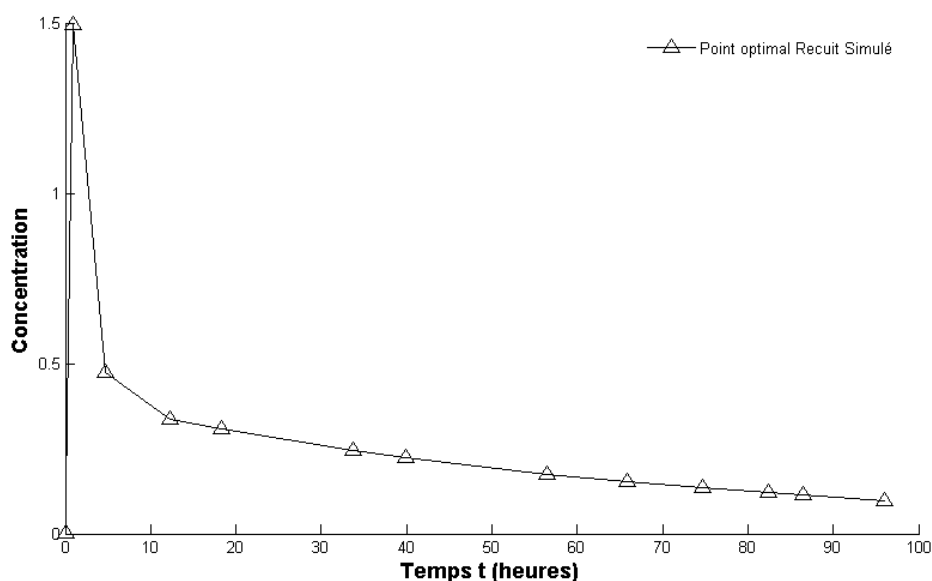


FIG. 4.3 – Points d'échantillonnage optimaux selon l'ARS pour des erreurs non corrélées.

4.3.2.6 Comparaison des plans selon l'algorithme Descente de Gradient et l'algorithme Recuit Simulé

On utilise le même nombre d'itérations $M = 2000$. Le tableau 4.3 donne le plan d'échantillonnage optimal selon ADG et ARS ainsi que les valeurs correspondantes de l'erreur quadratique moyenne J^* et de l'erreur d'approximation Q^* . On inclut aussi le *CPU* time pour comparer la rapidité des deux algorithmes.

Le tableau 4.3 ci-dessous nous confirme que lorsque les erreurs sont non corrélées, ARS fournit de meilleurs résultats que ADG car elle donne une valeur de $J_1^*(n)$ d'environ 2% inférieure que celle obtenue par la méthode ADG. Par ailleurs, la valeur de l'erreur d'approximation $Q_1^*(n)$ correspondante à ARS est inférieure d'environ 59% que celle obtenue par la méthode ADG. On remarque que le *CPU* time des deux algorithmes est identique.

ARS	ADG
0	0
0.92	0.48
4.63	2.38
12.26	6.53
18.25	12.35
33.74	16.58
39.96	25.10
56.51	29.55
65.83	42.38
74.74	46.93
82.40	65.95
86.42	69.46
96.0	96.00
$J_1^*(n) = 4.72$	$J_2^*(n) = 4.83$
$Q_1^*(n) = 0.12$	$Q_2^*(n) = 0.29$
$CPU = 2s$	$CPU = 2s$

TAB. 4.3 – Points d'échantillonnage optimaux, erreurs quadratiques moyennes $J_l^*(n)$, $l = 1, 2$, $n = 13$ et erreurs d'approximation $Q_l^*(n)$, $l = 1, 2$, pour des erreurs non corrélées.

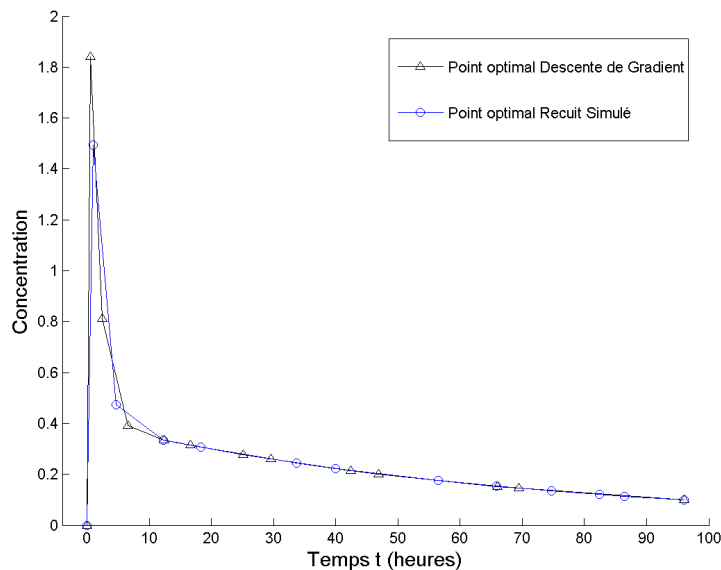


FIG. 4.4 – Points d'échantillonnage optimaux selon ADG et ARS lorsque les erreurs sont non corrélées et de variance non constante.

4.3.3 Erreurs corrélées avec variance non constante

On rappelle que lorsque les erreurs additives $\varepsilon(t_i)$ sont corrélées de fonction d'autocovariance définie par :

CHAPITRE 4 : Application à la pharmacocinétique

$$\text{cov}(\varepsilon(t_i), \varepsilon(t_j)) = E(\varepsilon(t_i)\varepsilon(t_j)) = \begin{cases} \sigma^2(t_i) & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i = j \\ \sigma(t_i)\sigma(t_j)\rho(t_i, t_j) & \forall i, j = 0, 1, \dots, n; i \neq j \end{cases}$$

où $\sigma(t_i)$ est défini par un modèle hétéroscédastique

$$\sigma(t_i) = 0.05 + 0.1g(t_i), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

On considère le processus d'erreur d'Ornstein - Uhlenbeck de fonction d'autocovariance $\rho(t_i, t_j) = \exp(-\lambda|t_i - t_j|)$; avec $\lambda > 0$. On fixe $\lambda = 1$ pour la simulation.

Remarque 4.3.1 *Pour appliquer ADG, il y a deux conditions que doit satisfaire la fonction objective J , la continuité et la dérivabilité. Puisque ce processus "Ornstein - Uhlenbeck" défini par sa fonction d'autocovariance $\rho(t, s) = \exp(-|t - s|)$ n'est pas dérivable, cela implique que la fonction objective J n'est pas dérivable, et par conséquent, on ne peut pas obtenir un minimum local par cet algorithme.*

On applique ARS afin d'obtenir les points d'échantillonnage optimaux basé sur 2000 itérations. Puis, on fait une comparaison de ce plan avec PC et PU. Les résultats sont résumés dans le tableau 4.4 ci-dessous. La figure 4.5 ci-dessous représente le plan d'échantillonnage optimal selon ARS. On déduit du tableau 4.4 que lorsque les erreurs sont corrélées, ARS donne une meilleure performance que PC et PU puisque son erreur quadratique moyenne correspondant $J_1^*(n)$ avec le plan d'échantillonnage optimal \mathbf{T}_n^* et son erreur d'approximation $Q_1^*(n)$ sont beaucoup plus petits. En effet, $J_1^*(n)$ correspondant au ARS est 44% plus petit que $J_2^*(n)$ du PC et 78% plus petit que PU (Cf Annexe A1 et A5 réalisés en MATLAB 7.0).

ARS	PC	PU
0.00	0.00	0.00
1.90	0.25	8.00
10.42	0.50	16.00
25.48	0.75	24.00
30.97	1.00	32.00
46.30	1.50	40.00
48.00	3.00	48.00
53.51	5.00	56.00
56.78	12.00	64.00
64.79	24.00	72.00
72.00	48.00	80.00
81.31	72.00	88.00
96.00	96.00	96.00
$J_1^*(n) = 4.87$	$J_2^*(n) = 8.77$	$J_3^*(n) = 22.42$
$Q_1^*(n) = -0.13$	$Q_2^*(n) = 0.29$	$Q_3^*(n) = -4.32$

TAB. 4.4 – Points d'échantillonnage optimaux, erreurs quadratiques moyennes $J_l^*(n)$, $l = 1, 2, 3$, $n = 13$ et erreurs d'approximation $Q_l^*(n)$, $l = 1, 2, 3$, selon le processus "Ornstein - Uhlenbeck" avec variance non constante.

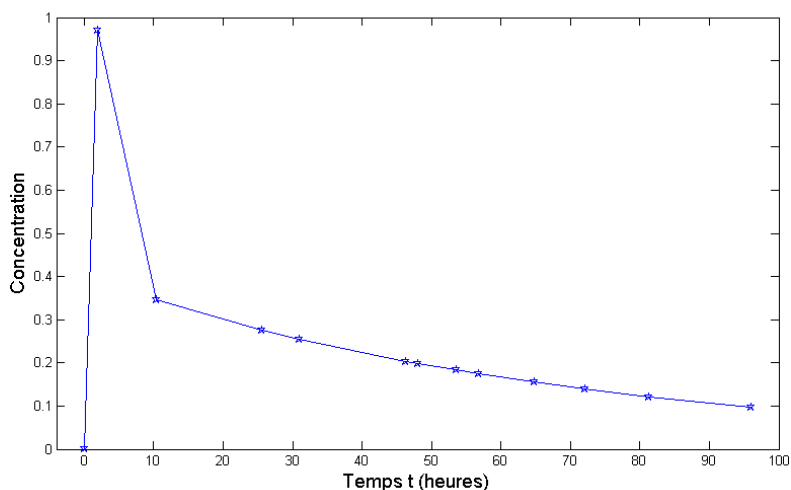


FIG. 4.5 – Points d'échantillonnage optimaux obtenus par ARS lorsque les erreurs sont corrélées selon le processus "Ornstein - Uhlenbeck" avec variance non constante.

Chapitre 5

Perspectives

5.1 Plans d'échantillonnage optimaux pour l'estimation non-paramétrique de la fonction de concentration et de l'AUC

On considère le problème statistique de l'estimation non-paramétrique de l'aire sous la courbe de concentration $g(\cdot)$ à partir d'un plan d'échantillonnage déterministe de taille n $\{t_{n,i}, i = 0, \dots, n\}$ du modèle :

$$Y(t_{n,i}) = g(t_{n,i}) + \varepsilon(t_{n,i}), i = 0, \dots, n,$$

où les erreurs $\varepsilon(t)$ forment un processus aléatoire autocorrélé avec une moyenne nulle $\mathbb{E}(\varepsilon(t)) = 0$ et une fonction d'autocovariance connue $\mathbb{E}(\varepsilon(t)\varepsilon(s)) = R(t, s)$.

On utilise d'abord un estimateur à noyaux du type Gasser et Müller de la courbe de concentration, on approxime ensuite l'aire sous cette courbe. Dans un premier temps, on étudie analytiquement le plan d'échantillonnage optimal lorsque la taille de l'échantillon est suffisamment grande ($n \rightarrow \infty$). Dans un deuxième temps, on cherche le plan d'échantillonnage optimal lorsque la taille est fixée et petite. Pour cela, on considère les différents algorithmes qui permettent d'engendrer l'échantillonnage optimal en minimisant l'erreur quadratique moyenne par rapport aux points d'échantillonnage.

Quand la fonction de régression $g(t)$ dépend d'un nombre infini des paramètres, on parle d'un modèle non-paramétrique. On estime $g(t), t \in [0, 1]$ par l'estimateur à noyaux défini par

$$\hat{g}(t) = \sum_{i=0}^n \omega_i(t) Y(t_{n,i}), \quad (5.1)$$

où, pour $i = 0, \dots, n$ les fonctions poids sont définies par

$$\omega_i(t) = \frac{K\left(\frac{t-t_{n,i}}{b}\right)}{\sum_{i=0}^n K\left(\frac{t-t_{n,i}}{b}\right)}.$$

Dans cette définition, K est une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , appelée noyau, et b est un paramètre réel strictement positif appelé, le paramètre de lissage ou largeur de fenêtre. Il vient immédiatement que :

$$0 \leq \omega_i(t) \leq 1, \quad \forall i = 0, \dots, n \text{ et } \sum_{i=0}^n \omega_i(t) = 1.$$

Le principe de l'estimateur à noyaux est le suivant : on estime la valeur $\hat{g}(t)$ qui correspond à une observation de Y en fonction de t en moyennant les $Y(t_{n,i}), i = 0, \dots, n$ selon une pondération qui accorde plus de poids aux $Y(t_{n,i})$ pour lesquels les $t_{n,i}$ sont proches de t .

Rôle de la largeur de fenêtre b : elle contrôle le nombre de termes retenus dans le calcul de la moyenne pondérée $\hat{g}(t)$.

Voici quelques exemples classiques de noyau :

1. Noyau uniforme : $K(t) = \frac{1}{2} \mathbb{1}_{[-1,+1]}(t)$,
2. Noyau quadratique : $K(t) = \frac{3}{4} (1 - t^2) \mathbb{1}_{[-1,+1]}(t)$,
3. Noyau gaussien : $K(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{t^2}{2})$.

Il faut préciser que l'estimateur à noyaux $\hat{g}(t)$ dépend de deux paramètres : le noyau K et la largeur de fenêtre b . On peut choisir la largeur de fenêtre b sur le plan pratique par la méthode qui s'appelle "validation croisée". Il faut aussi ajouter que les estimateurs $\hat{g}(t)$ peuvent parfois être étudiés ou modifiés lorsque l'objectif n'est pas d'estimer g mais plutôt certains aspects de g . Par ailleurs, il existe d'autres techniques d'estimation non-paramétrique comme les méthodes par spline, polynômes locaux, ondelettes. Enfin, il faut rappeler que les techniques de noyau s'adaptent très facilement à beaucoup de problèmes d'estimation fonctionnelle autre que l'estimation de régression.

On veut estimer la surface sous la courbe de la fonction de concentration définie par

$$\text{AUC}(g) = \int_0^1 g(t) dt$$

par l'estimateur linéaire suivant :

$$L_n(\hat{g}) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{\hat{g}}{h} \right)(t_{n,k}) + \left(\frac{\hat{g}}{h} \right)(t_{n,k+1}) \right)$$

où \hat{g} est défini en (5.1) et les points $t_{n,0} = 0$ et $t_{n,n} = 1$ sont fixés.

Le but est de sélectionner les temps d'observations $\{t_{n,1}^*, \dots, t_{n,n-1}^*\}$ qui minimisent l'erreur quadratique moyenne

$$\text{EQM}(L_n(\hat{g})) = \mathbb{E}(L_n(\hat{g}) - \text{AUC}(g))^2.$$

Pour celà, on étudiera le comportement asymptotique de cet estimateur et on cherchera un plan d'échantillonnage optimal lorsque la taille de l'échantillon est suffisamment grande ($n \rightarrow \infty$).

5.2 Méthodes algorithmiques

Cette partie est consacrée à l'étude du plan d'échantillonnage optimal de petite taille par une simulation du problème traité, pour l'estimation non-paramétrique de la fonction de concentration et de l'AUC. Par exemple, on peut utiliser des algorithmes, comme l'algorithme génétique ou recuit simulé, pour engendrer une solution globale pour l'obtention d'un plan d'échantillonnage optimal, et qui n'imposent pas de conditions restrictives pour leur application à notre problème.

Bibliographie

- [1] Abt, M., Liski, E.P., Mandal, N.K. et Sinha, B.K. (1997). Optimal designs in growth curve models : Part I Correlated model for linear growth : Optimal designs for slope parameter estimation and growth prediction. *Journal of Statistical Planning and Inference*. 64, 141–150.
- [2] Abt, M., Liski, E.P., Mandal, N.K. et Sinha, B.K. (1998). Optimal designs in growth curve models : Part II Correlated model for quadratic growth : Optimum designs for slope parameter estimation and growth prediction. *Journal of Statistical Planning and Inference*. 67, 287–296.
- [3] Atkinson, A. C., Chaloner, K., Herzberg, A. M. et Juritz, J. (1993). Optimum experimental designs for properties of a compartmental model. *Biometrics*. 49, 325–337.
- [4] Atkinson, A. C., Donev, A. N. et Tobias, R. D. (2007). Optimum experimental designs. *with SAS, Oxford : Oxford University Press*.
- [5] Atkinson, A.C. et Donev, A.N. (1992). Optimum Experimental Designs. Oxford : Clarendon Press.
- [6] Atkinson, A. (1970). The design of experiments to estimate the slope of a response surface. *Biometrika*. 57, 319–328.
- [7] Bailer, A.J. et Piegorisch, W.W (1990). Estimating integrals using quadrature methods with an application in pharmacokinetics. *Biometrics*. 46(4), 1201–11.
- [8] Benhenni, K. et Cambanis, S. (1992a). Sampling designs for estimating integrals of stochastic processes. *Annals of Statistics*. 20, 161–194.
- [9] Benhenni, K. (1998). Predicting integrals of stochastic processes : Extensions. *Journal of Applied Probability*. 35, 843–855.
- [10] Berndt B. C et Joshi P. T. (1983). Chapter 9 of Ramanujan’s Second Notebook : Infinite Series Identities, Transformations, and Evaluations. *Contemporary Mathematics. American Mathematical Society* 23.
- [11] Bickel, P.J., Herzberg, A.M. et Schilling, M.F. (1981). Robustness of Design Against Autocorrelation in Time II : Optimality, Theoretical and Numerical Results for the First-Order Autoregressive Process. *Journal of the American Statistical Association*. 76, 870–877.
- [12] Bickel, P.J. et Herzberg, A.M. (1979). Robustness of design against autocorrelation in time I. Asymptotic theory, optimality for location and linear regression. *Annals of Statistics*. 7, 77–95.

BIBLIOGRAPHIE

- [13] Biedermann, S. et Dette, H. (2001). Minimax optimal designs for non-parametric regression : a further optimality property of the uniform distribution. In, *Atkinson, Anthony C., Hackl, Peter and Müller, Werner G. (eds.) MODA6 : Advances in Model-Oriented Design and Analysis, New York, Physica-Verlag, 13–20.*
- [14] Bischoff, W. (1995). Lower bounds for the efficiency of designs with respect to the D-criterion when the observations are correlated. *Statistics. 27, 27–44.*
- [15] Blanke, D. et Vial, C. (2008). Assessing the number of mean square derivatives of a Gaussian process. *Stochastic Processes and their Applications. 118(10), 1852–1869.*
- [16] Blanke, D. et Vial, C. (2012). On estimation of regularity for Gaussian processes. *article en ligne, hal-00750409, version 1. 09/11/2012.*
- [17] Bohachevsky, I. O., Johnson, M. E. et Stein, M. L. (1986). Generalized simulated annealing for function optimization. *Technometrics. 28, 209–217.*
- [18] Boltze, L. et Näther, W. (1982). On effective observation methods in regression models with correlated errors. *Mathematische Operationsforschung und Statistik. Series Statistics. 13, 507–519.*
- [19] Brimkulov, U., Krug et Savanov, V. (1980). Numerical construction of exact experimental designs when the measurements are correlated (In Russian). *Zavodskaya Laboratoria. 36 , 435–442*
- [20] Cambanis, S. (1985). Sampling designs for time series. *Handbook of Statistics, 5 : Time Series in Time Domain (eds. E. J. Hannan, P. R. Krishnaiah and M. M. Rao). North-Holland, Amsterdam. 337–362.*
- [21] Cambanis, S. et Su, Y. (1993). Sampling designs for regression coefficient estimation with correlated errors. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics. 46, 707–722.*
- [22] Cambanis, S. et Masry, E. (1983). Sampling designs for the detection of signals in noise. *IEEE Transactions on Information Theory. 29(1), 83–104.*
- [23] Choi, L., Caffo, B. et Rohde, C. (2004). Optimal Sampling Times in Bioequivalence Studies Using a Simulated Annealing Algorithm. *Statistics and Computing. 17, 337–347.*
- [24] Davidian, M. et Giltinan, D. M (1995). Nonlinear models for repeated measurement data. *Chapman and Hall.*
- [25] Dette, H. et Braess, D. (2007). On the number of support points of maximin and bayesian d-optimal designs in nonlinear regression models. *Annals of Statistics. 35, 772–792.*
- [26] Dette, H., Kunert, J. et Pepelyshev, A. (2006). Exact Optimal Designs for Weighted Least Squares Analysis with Correlated Errors. *Technical Report, Universität Dortmund, SFB 475 Komplexitätsreduktion in Multivariaten Datenstrukturen, No.4.*

BIBLIOGRAPHIE

- [27] Dette, H., Leonenko, N., Pepelyshev, A. et Zhigljavsky, A.(2009). Asymptotic optimal designs under long-range dependence error structure. *Bernoulli*. 15(4), 1036–1056.
- [28] Dette, H., Melas, V. B. et Pepelyshev, A. (2010). Optimal designs for estimating the slope of a regression. *Annals of Statistics*. 44, no.6, 617–628.
- [29] Dette, H., Melas, V., et Pepelyshev, A. (2003). Standardized maximin e-optimal designs for the michaelis-menten model. *Statistica Sinica*. 13, 1147–1163.
- [30] Dette, H., Pepelyshev, A. et Letz, T.H.(2010). Optimal designs for random effect models with correlated errors with applications in population pharmacokinetics. *Annals of Applied Statistics*. 4(3), 1430–1450.
- [31] Duffull, S. B., Retout, S. et Mentré, F. (2002). The use of simulated annealing for finding optimal population designs. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*. 69, 25–35.
- [32] Eubank, R. L., Smith, P. L. et Smith, P. W. (1982). On the computation of optimal designs for certain time series models with applications to optimal quantile selection for location or scale parameter estimation. *SIAM Journal on Scientific Computing*. 3, 238–249.
- [33] Fedorov, V. V. (1972). Theory of optimal experiments. *Academic Press, New York*.
- [34] Ferreira, E., Núñez–Antón, V. et Rodríguez-Póo, J. (1997). Kernel regression estimates of growth curves using nonstationary correlated error. *Statistics & Probability Letters*. (34)4, 413–423.
- [35] Gaffke, N. et Krafft, O. (1982). Exact D-optimum designs for quadratic regression. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*. 44, 394–397.
- [36] Galtchouk, L. et Pergamenchtchikov, S. (2009). Sharp non-asymptotic oracle inequalities for nonparametric heteroscedastic regression models. *Journal of Nonparametric Statistics*. 1–26.
- [37] Gasser, T. et Müller, M.G (1984). Estimating regression functions and their derivatives by the kernel method. *Scandinavian Journal of Statistics*. 11, 171–185.
- [38] Goffe, W. L., Ferrier, G. D. et Rogers, J. (1994). Global optimization of statistical functions with simulated annealing. *Journal of Econometrics*. 60, 65–99.
- [39] Hader, R. et Park, S. (1978). Slope-rotatable central composite designs. *Technometrics*. 20, 413–417.
- [40] Hamonier, J. (2012). Analyse par ondelettes du mouvement multifractionnaire stable linéaire. *Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologie de Lille - Lille 1*.
- [41] Hoel, P.G. (1958). Efficiency Problems in Polynomial Estimation. *Annals of Mathematical Statistics*. 29, 1134–1145 .

BIBLIOGRAPHIE

- [42] Hohmann, G. et Jung, W. (1975). On sequential and nonsequential D-optimal experimental design. *Biometr. Z.* 17, 329–336.
- [43] Imhof, L. (2000). Exact designs minimising the integrated variance in quadratic regression. *Statistics.* 34, No.2, 103–115.
- [44] Imhof, L., Krafft, O. et Schaefer, M. (2000). D-optimal exact designs for parameter estimation in a quadratic model. *Sankhya. Series B.* 62, No.2, 266–275.
- [45] Imhof, L. (1998). A-optimum exact designs for quadratic regression. *J. Math. Anal. Appl.* 228, No.1, 157–165.
- [46] Iouditski, A.(2012).
<http://www-ljk.imag.fr/membres/Anatoli.Iouditski/cours/optimisation/magistere.pdf>.
- [47] Istas, J. et Lang, G. (1997). Quadratic variations and estimation of the local Hölder index of a Gaussian process. *Annales de l'Institut Henri Poincaré (B) Probability and Statistics.* 33(4), 407–436.
- [48] Istas, J. (1996). Estimating the singularity function of a Gaussian process with applications. *Scandinavian Journal of Statistics.* 23, 581–595.
- [49] Jones, B. et Wang, J. (1999). Constructing optimal designs for fitting pharmacokinetic models. *Statistics and Computing.* 9, 209–218.
- [50] Katz, D. et D.Z. D'Argenio (1983). Experimental Design for Estimating Integrals by Numerical Quadrature with Applications to Pharmacokinetic Systems. *Biometrics.* 39, 621–628.
- [51] Kendall E. Atkinson (1976). A Survey of Numerical Methods for the Solution of Fredholm Integral Equations of the Second Kind.
- [52] Kong, F. H. et Gonin, R. (2000). Optimal sampling times in bioequivalence tests. *Journal of Biopharmaceutical Statistics.* 10, 31–44.
- [53] Kubáček, L., Kubáčova, L. et Volaufová, J. (1995). statistical models with linear structures. *Veda Publishing House.*
- [54] Kunert, J. (1985). Optimal repeated measurements designs for correlated observations and analysis by weighted least squares. *Biometrika.* 72, 375–389.
- [55] Mandal, N. and Heiligers, B. (1992). Minimax designs for estimating the optimum point in a quadratic response surface. *Journal of Statistical Planning and Inference.* 31, 235–244.
- [56] Martin, R.J. (1996). Spatial Experimental Design. *Handbook of Statistics 13 (Ghosh, S. and Rao, C.R., eds).* North-Holland, Amsterdam. 477–514.
- [57] Melas, V., Pepelyshev, A. et Cheng, R. (2003). Designs for estimating an extremal point of quadratic regression models in a hyperball. *Metrika.* 58, 193–208.
- [58] Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M. et Teller, A. (1953). Equation of state calculation by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics.* 21, 1087–1092.

BIBLIOGRAPHIE

- [59] Morrison, D. F. (1970). The optimal spacing of repeated measurement. *Biometrics*. 28, 681–290.
- [60] Müller, W. et Pazman, A. (2003). Measures for designs in experiments with correlated errors. *Biometrika*. 90, 423–434.
- [61] Müller-Gronbach, T. et Ritter, K. (1997). Spatial adaptation for predicting random functions. Preprint No. A–6–97. *Fachbereich Mathematik, FU Berlin, Berlin*.
- [62] Mukerjee, R. et Huda, S. (1985). Minimax second- and third-order designs to estimate the slope of a response surface. *Biometrika*. 72, 173–178.
- [63] Murthy, V. and Studden, W. (1972). Optimal designs for estimating the slope of a polynomial regression. *Journal of the American Statistical Association*. 67, 869–873.
- [64] Myres, R. et Lahoda, S. (1975). A generalization of the response surface mean square error criterion with a specific application to the slope. *Technometrics*. 17, 481–486.
- [65] Näther, W. (1985a). Effective observation of random fields. *Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig*.
- [66] Näther, W. (1985b). Exact design for regression models with correlated errors. *Statistics*. 16, 479–484.
- [67] Núñez-Antón, V. et Woodworth, G. (1994). Analysis of longitudinal data with unequally spaced observations and time dependent correlated errors. *Bio-metrics*. 50, 445–456.
- [68] Ott, L. et Mendenhall, W. (1972). Designs for estimating the slope of a second order linear model. *Technometrics*. 14, 341–353.
- [69] Parzen, E. (1961). Regression analysis of continuous parameter time series. *Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, University of California press, Berkeley. 1, 469–489.
- [70] Pázman, A. et Müller, W. G. (2001). Optimal design of experiments subject to correlated errors. *Statistics and Probability Letters*. 52, 29–34.
- [71] Pazman, A. and Müller, W. (2000). Optimal Design of Experiments Subject to Correlated Errors. *Forschungsberichte, Institut für Statistik, 77. Department of Statistics and Mathematics, WU Vienna University of Economics and Business, Vienna*.
- [72] Pázman, A. et Müller, W. G. (1998). A new interpretation of design measures. In Anthony, A., Pronzato, L. and Wynn, H., editors, *Model-Oriented Data Analysis and Experimental Design*. *Physica Verlag, Heidelberg*. 5, 239–246.
- [73] Perrin, O. (1999). Quadratic variation for Gaussian processes and application to time deformation. *Stochastic Processes and their Applications*. 82(2), 293–305.
- [74] Petit, N. (2007). École Nationale Supérieure des Mines de Paris. <http://cas.ensmp.fr/petit/ESoptimisation/poly.pdf>.

BIBLIOGRAPHIE

- [75] Piegorsch, W. W. et Bailer, A. J. (1989). Optimal design allocations for estimating area under curves for studies employing destructive sampling. *Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics*. 17, 493–507.
- [76] Pronzato, L. et Walter, E. (1993). Experimental design for estimating the optimum point in a response surface. *Acta Applicandae Mathematicae*. 33, 45–68.
- [77] Pukelsheim, F. (1993). *Optimal Design of Experiments*. New York : Wiley.
- [78] Ritter, K. (2000). average-case analysis of numerical problems. *Lecture Notes in Mathematics*. 1733, Springer.
- [79] Sacks, J. et Ylvisaker, D. (1966). Designs for regression problems with correlated errors. *Annals of Mathematical Statistics*. 37, 66–89.
- [80] Sacks, J. et Ylvisaker, D. (1968). Designs for regression problems with correlated errors ; many parameters. *Annals of Mathematical Statistics*. 39, 49–69.
- [81] Schempp, W. (1981). Cubature, quadrature, and group actions. *Mathematical Reports of the Academy of Science*. 3, 337–342.
- [82] Schoenfelder, C. (1978). Random designs for estimating integrals of stochastic processes. *Institute of Statistics Mimeo Series No. 1201, University of North Carolina, Chapel Hill*.
- [83] Seleznev, O. (2000). Spline approximation of random processes and design problems. *Journal of Statistical Planning and Inference*. 84(1-2), 249–262.
- [84] Silvey, S. (1980). *Optimal Design*. Chapman and Hall, London.
- [85] Tertois, S. (2003). Réduction des effets des non-linérités dans une modulation multiporteuse à l'aide de réseaux de neurones. *Thèse de doctorat, Université de Rennes I*.
- [86] Wagner, J. G. et Ayres, J.W. (1977). Bioavailability assessment : Methods to estimate total area and total amount excreted and importance of blood and urine sampling scheme with application to digoxin. *Journal of pharmacokinetics and Biopharmaceutics*. 5, 533–557.
- [87] Wang, J. (2001). Optimal design for linear interpolation of curves. *Statistics in Medicine*. 20, 2467–2477.
- [88] Zhigljavsky, A., Dette, H. et Pepelyshev, A. (2010). A new approach to optimal design for linear models with correlated observations *Journal of the American Statistical Association*. 105(491), 1093–1103

Annexes

Annexe A1

Cet Annexe donne la fonction objective J qui représente l'erreur quadratique moyenne et l'erreur d'approximation de l'intégrale I par l'estimateur des Trapèzes Q quand les erreurs ne sont pas corrélées pour l'exemple de la pharmacocinétique.

```
function [y1,y2]=w7(t1)
for i = 1 : 13
F(i)=-2.4*exp(-10*t1(i))+2*exp(-0.65*t1(i))+0.4*exp(-0.0146*t1(i));
%fonction de concentration dans le plasma (ng/ml) de la
%digoxine après absorption du médicament sachant que
%le temps est mesuré en heures
F1(i)=24*exp(-10*t1(i))-1.3*exp(-0.65*t1(i))
-0.00584*exp(-0.0146*t1(i));%fonction dérivée de F
G(i) = 0.05 + 0.1 * F(i); % l'écart-type d' erreur
G1(i) = 0.1 * F1(i);
%G1 représente la dérivée de G par rapport à t1 en t1
% G1=0.1 * F'(i)=0.1*F1(i)
end
%-----
X = 0;
for j = 1 : 11
X = X + (G(j+1) ^ 2) * (t1(j + 2) - t1(j )) ^ 2;
end
Z1 = (0.25) * (G(1) ^ 2 * (t1(2) - t1(1)) ^ 2 + X
+ G(13) ^ 2 * (t1(13) - t1(12)) ^ 2);
% Z1 c'est R^2 , le termes liés aux erreurs d'observations
%-----
y = 0;
for j1 = 1 : 11
y = y + F(j1+1) * (t1(j1 + 2) - t1(j1 ));
end
Q8=(0.5) * (F(1) * (t1(2) - t1(1)) + y + F(13) * (t1(13) - t1(12)))
% Q8,l'approximation de l'intégrale par l'estimateur des Trapèzes
I=23.4889; % La valeur exacte de l'intégrale
```

ANNEXES

```
Q=Q8-I;%l'erreur d'approximation de l'intégrale par l'estimateur
%des Trapèzes
%-----
Z = Z1 + Q ^ 2;
% J=Z , la fonction objective
disp('fonction objective (erreur quadratique moyenne J=y1')
y1=Z
disp('erreur approximation de intégral Q =y2 ')
y2= Q
```

Annexe A2

Cet Annexe donne les points optimaux et la valeur optimale de la fonction objective J et l'erreur d'approximation Q , ainsi que le nombre optimal d'itérations et le pas optimal selon l'algorithme Descente de Gradient quand les erreurs ne sont pas corrélées pour l'exemple de la pharmacocinétique.

```

clear
clc
close all
format long g
t1=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96];
%on considère que t1(1)=0 et t1(13)= 96 sont fixés et
t1(2)-- t1(12) sont des variables
a=1;
m=0;
N=100;
for il=1 : N
%-----
for i = 1 : 13
F(i)=-2.4*exp(-10*t1(i))+2*exp(-0.65*t1(i))+0.4*exp(-0.0146*t1(i));
%fonction de concentration dans le plasma (ng/ml) de la
%digoxine après absorption du médicament sachant que
%le temps est mesuré en heures
F1(i)=24*exp(-10*t1(i))-1.3*exp(-0.65*t1(i))
-0.00584*exp(-0.0146*t1(i));% fonction dérivée de F
G(i) = 0.05 + 0.1 * F(i); % fonction d'écart type
G1(i) = 0.1 * F1(i);%fonction dérivée de G
end
%-----
X = 0;
for j = 1 : 11
X = X + (G(j+1) ^ 2) * (t1(j + 2) - t1(j )) ^ 2;
end
Z1 = (0.25) * (G(1) ^ 2 * (t1(2) - t1(1)) ^ 2 + X
+ G(13) ^ 2 * (t1(13) - t1(12)) ^ 2);
% Z1 c'est R^2 , le terme lié aux erreurs d'observations
%-----
y = 0;
for j1 = 1 : 11
y = y + F(j1+1) * (t1(j1 + 2) - t1(j1 ));
end
Q8=(0.5) * (F(1) * (t1(2) - t1(1)) + y + F(13) * (t1(13) - t1(12)))
% Q8,l'approximation de l'intégrale par l'estimateur des Trapèzes
I=23.4889; % La valeur exacte de l'intégrale
Q=Q8-I;%l'erreur d'approximation de l'intégrale par l'estimateur
%des Trapèzes

```

ANNEXES

```

%-----
Z = Z1 + Q ^ 2;
% J=Z , la fonction objective
%-----
% soit Q1 la matrice des derivées de Q
% Q1=Q'
%-----
Q1(1)=0;
Q1(13)=0;
Q1(2)=(0.5) * (F(1) + F1(2) * (t1(3) - t1(1)) - F(3));
Q1(12)=(0.5) * (F(11) + F1(12) * (t1(13) - t1(11)) - F(13));
for i=3 : 11
Q1(i)=(0.5) * (F(i-1) + F1(i) * (t1(i+1) - t1(i-1)) - F(i+1));
end
%-----
% soit Q2 la matrice des derivées de Q^2
% cela signifie que Q2=(Q^2)'
Q2(1)=0;
Q2(13)=0;
Q2(2)=2*Q*Q1(2);
Q2(12)=2*Q*Q1(12);
for j=3:11
    Q2(j)=2*Q*Q1(j);
end
%-----
%soit maintenant la matrice R1 qui représente les derivées de R ^2
%R1=(R^2)'=(Z1)'

R1(1)=0;
R1(13)=0;
R1(2)= (0.25) * (2 * G(1) ^ 2 * (t1(2) - t1(1))
+ 2 * G(2) * G1(2) * (t1(3) - t1(1)) ^ 2
- 2 * G(3) ^ 2 * (t1(4) - t1(2)));
R1(12)= (0.25) * (2 * G(11) ^ 2 * (t1(12) - t1(10))
+ 2 * G(12) * G1(12) * (t1(13) - t1(11)) ^ 2
- 2 * G(13) ^ 2 * (t1(13) - t1(12)));
for i=3:11
    R1(i)= (0.25) * (2 * G(i-1) ^ 2 * (t1(i) - t1(i-2))
+ 2 * G(i) * G1(i) * (t1(i+1) - t1(i-1)) ^ 2
- 2 * G(i+1) ^ 2 * (t1(i+2) - t1(i)));
end
%-----
%soit J1=Q2+R1 le vecteur qui représente les derivées de la
%fonction J qui est dans notre programme notée par Z,
%on définit J1 comme une matrice

```


ANNEXES

```
for i=1:13
    J1(i)=Q2(i)+R1(i);
end
%-----
on note par J2 à la norme de J1, J2^2=sum(J1.^2)
%-----

format long
for i=1:13
t2(i)=t1(i)-a*J1(i);
end
J=fss(t2);
R=fss(t1)-0.8*a*J2;
format long
%-----
if R<J
    disp('R-J<0')
    a=a/(1.1)
    format long
    for i=1:13
t2(i)=t1(i)-a*J1(i);
end

J=fss(t2);
R=fss(t1)-0.8*a*J2;
%fss est une fonction qui calcule la valeur de la fonction
objective
%J représente l'erreur quadratique moyenne
%fss est programmée comme le programme 1 mais avec une seule sortie

format long g
t2
R
J

end
%-----
if R>J

m=m+1;
i1
disp('R-J>0');
R
J
a
t2
```

ANNEXES

```
end
%-----
end % for i1=1 : N
%-----
disp('n est le nombre des fois pour lesquelles R<J')
n=N-m % n c'est le nombre des fois pour lesquelles R<J
disp('indice optimal n1')
n1=n+1 % n1 c'est la première valeur de i pour laquelle
% R>J et qui correspond au vecteur des points optimaux
a_optimal=a;
%-----
for i=1:N
    if i==n1
        ponint_optimal=t2
        J_optimal=fss(t2)
    end
end
%-----

%ce programme nous améliore les points optimaux après N1
itérations

format long g
t1=ponint_optimal;
ponint_optimal=t1'
a=a_optimal;
J_optimal
indice_optimal=n1
%-----
%maintenant, on améliore les points optimaux
N1=2000;
%N1 le nombre des itérations pour atteindre les points optimaux
%-----
for i2=1 :N1
%-----
for i = 1 : 13
F(i)= -2.4*exp(-10*t1(i))+2*exp(-0.65*t1(i))+0.4*exp(-0.0146*t1(i))
F1(i)= 24*exp(-10*t1(i))-1.3*exp(-0.65*t1(i))
-0.00584*exp(-0.0146*t1(i));
G(i) = 0.05 + 0.1 * F(i);
G1(i) = 0.1 * F1(i);

end
%-----
X = 0;
```

ANNEXES

```

for j = 1 : 11
X = X + (G(j+1) ^ 2) * (t1(j + 2) - t1(j )) ^ 2;
end
Z1 = (0.25) * (G(1) ^ 2 * (t1(2) - t1(1)) ^ 2 + X
+ G(13) ^ 2 * (t1(13) - t1(12)) ^ 2);
%-----
y = 0;
for j1 = 1 : 11
y = y + F(j1+1) * (t1(j1 + 2) - t1(j1 ));
end
Q8=(0.5) * (F(1) * (t1(2) - t1(1)) + y + F(13) * (t1(13) - t1(12)))
I=23.4889;
  Q = Q8 - I;
%-----
  Z = Z1 + Q ^ 2;
%J=Z ,
%-----
% soit Q1 la matrice des derivées de Q
% Q1=Q'
%-----
Q1(1)=0;
Q1(13)=0;
Q1(2)=(0.5) * (F(1) + F1(2) * (t1(3) - t1(1)) - F(3));
Q1(12)=(0.5) * (F(11) + F1(12) * (t1(13) - t1(11)) - F(13));
for i=3 : 11
Q1(i)=(0.5) * (F(i-1) + F1(i) * (t1(i+1) - t1(i-1)) - F(i+1));
end
%-----
%soit Q2 la matrice des derivées de Q^2
%cela signifie que Q2=(Q^2)'
Q2(1)=0;
Q2(13)=0;
Q2(2)=2*Q*Q1(2);
Q2(12)=2*Q*Q1(12);
for j=3:11
  Q2(j)=2*Q*Q1(j);
end
%-----
%soit maintenant la matrice R1 qui représente les derivées de R ^2
%R1=(R^2)'=(Z1)'
R1(1)=0;
R1(13)=0;
R1(2)= (0.25) * (2 * G(1) ^ 2 * (t1(2) - t1(1))
+ 2 * G(2) * G1(2) * (t1(3) - t1(1)) ^ 2
- 2 * G(3) ^ 2 * (t1(4) - t1(2)));
R1(12)= (0.25) * (2 * G(11) ^ 2 * (t1(12) - t1(10))

```

ANNEXES

```

+ 2 * G(12) * G1(12) * (t1(13) - t1(11)) ^ 2
- 2 * G(13) ^ 2 * (t1(13) - t1(12));
for i=3:11
    R1(i)= (0.25) * (2 * G(i-1) ^ 2 * (t1(i) - t1(i-2))
    + 2 * G(i) * G1(i) * (t1(i+1) - t1(i-1)) ^ 2
    - 2 * G(i+1) ^ 2 * (t1(i+2) - t1(i)));
end
%-----
%soit J1=Q2+R1 le vecteur qui représente les dérivées de la
%fonction J qui est dans notre programme notée par Z,
%on définit J1 comme une matrice

    for i=1:13
        J1(i)=Q2(i)+R1(i);
    end
%-----
%on note par J2 à la norme de J1, J2^2=sum(J1.^2)

format long
for i = 1 : 13
t2(i)=t1(i)-a*J1(i);
end
%-----
J=fss(t2);
R=fss(t1)-0.8*a*J2;
t1=t2;

%-----
end % for i2=1 :N1
%-----

ponint_optimal=t1;
J_optimal_=fss(t1);
t1=ponint_optimal;
N1;
error_optimal=w4(t1);
I=23.4889;
trapez_optimal=error_optimal+I;
disp('erreur quadratique moyenne optimale est ')
J_optimal_
disp('erreur approximation optimale est ')
error_optimal
disp('points optimaux sont ')
ponint_optimal=t1'
disp('le nombre optimal des itérations N1 ')
N1

```

Annexe A3

Cet Annexe calcule la valeur de la fonction objective J lorsque les erreurs sont corrélées selon le processus "Ornstein - Uhlenbeck" avec variance non constante pour l'exemple de la pharmacocinétique.

```

fonction [y]=J(t)
%t=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96];

for i = 1 : 13
F(i)=-2.4*exp(-10*t(i))+2*exp(-0.65*t(i))+0.4*exp(-0.0146*t(i));
%fonction de concentration dans le plasma (ng/ml) de la
%digoxine après absorption du médicament sachant que
%le temps est mesuré en heures
F1(i)=24*exp(-10*t1(i))-1.3*exp(-0.65*t1(i))
-0.00584*exp(-0.0146*t1(i)); % fonction dérivée de F
G(i)= 0.05 + 0.1 * F(i); % fonction d'écart type
G1(i)= 0.1 * F1(i); %fonction dérivée de G
end
%-----
X = 0;
for j = 1 : 11
X = X + (G(j+1) ^ 2) * (t(j + 2) - t(j)) ^ 2;
end
%-----
P1=0;
for j = 1 : 11
P1= P1 + G(j+1)*(t(j + 2) - t(j))*exp(-t(j + 1));
end
P11=(t(2)-t(1))*G(1)*P1*exp(t(1));
%E(xy)=P11
%-----
P22=(t(2)-t(1))*(t(13)-t(12))*G(1)*G(13)*exp(-(t(13)-t(1)));
%E(xz)=P22
%-----
P3=0;
for j = 1 : 11
P3= P3 + G(j+1)*(t(j + 2) - t(j))*exp(t(j + 1));
end
P33=(t(13)-t(12))*G(13)*P3*exp(-t(13));
%E(yz)=P33
%-----
P=0.5*(P11+P22+P33);
%-----

%X2=sumsum t1(j+1)*(t1(i+2)-t1(i))*(t1(j+2)-t1(j))
m=11;

```

ANNEXES

```
X2=0;
for i=2:m
for j=1:i-1
X2= X2
+exp(-(t(i+1)-t(j+1)))*(t(i+2)-t(i))*(t(j+2)-t(j))*G(j+1)*G(i+1);
end
end
%-----

RR = (0.25) * (G(1) ^ 2 * (t(2) - t(1)) ^ 2 + X
+ G(13) ^ 2 * (t(13) - t(12)) ^ 2)+P+0.5*X2 ;
%RR c'est R^2+0.5(E(xy)+E(xz)+E(yz))+0.5*X2=J
%-----
y = 0;
for j1 = 1 : 11
y = y + F(j1+1) * (t(j1 + 2) - t(j1 ));
end
%-----
Q8=(0.5) * (F(1) * (t(2) - t(1)) + y + F(13) * (t(13) - t(12)));
%I=23.4889
%disp('approche integrale=');
Q8;
Q = Q8 - 23.4889;
Z = RR + Q ^ 2;
%disp('erreur quadratique moyenne est J=Z ');
y=Z;
```

Annexe A4

Cet Annexe donne les points optimaux et la valeur optimale de la fonction objective J (dans cet annexe notée par fss) et l'erreur d'approximation Q selon l'algorithme récuit simulé quand les erreurs ne sont pas corrélées pour l'exemple de la pharmacocinétique.

```

clear
clc
close all
%-----
L1=50%le nombre des espaces
for j=1:L1
%-----
%t=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96]
format long g
L=2000;%convergece L=2000
T=zeros(1,L);
val =zeros(1,L-1);
h=zeros(1,13);
b=zeros(1,13);
v=zeros(1,13);
v=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96];
for l=2:L
    %ref = [2, 3, 4, 5, 6,7,8,9,10,11,12];
    val(l) = 2+binornd(10,1/11);
    k=val(l);
    T(l)=1;
    T(l)=T(l)/log(l);
    r=v(k-1)+v(k+1)*rand(1);
    for i=1:13
        h(i)=v(i);
        if i==k
            h(i)=r;
        end
    end
    h=sort(h);
    z1=fss(v);z2=fss(h);
    p=min(exp((z1-z2)/T(l)),1);
    u=rand(1);
    if u<=p
        b=h;
    end
    if u>p
        b=v;
    end
    v=b;
end

```

ANNEXES

```
end
%disp('points optimaux sont ')
%v
% disp('erreur quadratique moyenne optimale est ')
%J1(v)
%disp('val ')
%val
  %disp('erreur approximation intégral
  correspondante aux points optimaux est ')
  %w4(v )
  %disp('tracer la courbe de la foction trois
  exponetiel qui passe des points optimaux ')
  %plot(v,fi(v))
  %-----
  if abs(w4(v ))<0.3
    % if fss(v)<4.71637984063643
      j
    disp('points optimaux sont ')
    v'
    disp('erreur quadratique moyenne optimale est ')
    fss(v)
    %disp('val ')
    %val
    disp('erreur approximation intégral correspondante
    aux points optimaux est')
    w4(v )
    disp('tracer la courbe de la foction trois
    exponetiel qui passe des points optimaux')
    plot(v,fi(v))
    % end % fss(v)<4.71637984063643
  end
  %-----
end % for j
disp('end')
```


Annexe A5

Cet Annexe donne les points optimaux et la valeur optimale de la fonction objective J et l'erreur d'approximation Q selon l'algorithme récuit simulé lorsque les erreurs sont corrélées selon le processus "Ornstein - Uhlenbeck" avec variance non constante pour l'exemple de la pharmacocinétique.

```

clear
clc
close all
%-----
L1=50%le nombre des espaces
for j=1:L1
%-----
%t=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96]
format long g
L=2000;%convergece L=2000
T=zeros(1,L);
val =zeros(1,L-1);
h=zeros(1,13);
b=zeros(1,13);
v=zeros(1,13);
v=[0, 0.25 , 0.5 ,0.75 ,1 ,1.5, 3 ,5 ,12, 24 ,48 ,72 ,96];
for l=2:L
    %ref = [2, 3, 4, 5, 6,7,8,9,10,11,12];
    val(l) = 2+binornd(10,1/11);
    k=val(l);
    T(l)=1;
    T(l)=T(l)/log(l);
    r=v(k-1)+v(k+1)*rand(1);
    for i=1:13
        h(i)=v(i);
        if i==k
            h(i)=r;
        end
    end
    h=sort(h);
    z1=J(v);z2=J(h);
    p=min(exp((z1-z2)/T(l)),1);
    u=rand(1);
    if u<=p
        b=h;
    end
    if u>p
        b=v;
    end
    v=b;
end

```

ANNEXES

```
end %for l=2:L
%disp('points optimaux sont ')
%v
% disp('erreur quadratique moyenne optimale est ')
%J(v)
%disp('val ')
%val
% disp('erreur approximation intégral correspondante
aux points optimaux est ')
% w4(v )
% disp('tracer la courbe de la foction trois exponetiel
qui passe des points optimaux ')
%plot(v,fi(v))
if abs(w4(v ))<0.3
    %if J(v)<4.66
j
disp('points optimaux sont ')
v'
disp('erreur quadratique moyenne optimale est ')
J(v)
%disp('val ')
%val
disp('erreur approximation intégral correspondante
aux points optimaux est ')
w4(v )
disp('tracer la courbe de la foction trois
exponetiel qui passe des points optimaux ')
plot(v,fi(v))
    %end %if J(v)<4.66
end % if abs(w4(v ))<0.3
%-----
end % for j
```

Annexe A6

Cet Annexe donne la graphe de $\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}_a)$ correspondant à l'exemple 1.6.1 avec le plan d'échantillonnage optimal régulier pour $\lambda = 1, \sigma^2 = 1$ et $\lambda = 10, \sigma^2 = 1$.

```

clear
clc
close all
hold on
%-----estimateur BLUE-----
m=30;
p1=zeros(1,m);
n1=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
%L=2;
%u=1,10
u=1;v=1;
l1=(6*u*v)/(u^2+3*u+3);
%l=s^2=(u^2+3*u+3)/(6*u*v)
% l1=1/l=(6*u*v)/(u^2+3*u+3)
%a=zeros(1,2);
%a(1)=0;a(2)=1;
t=zeros(1,n+1);
z1=zeros(1,n+3);
R=zeros(n+1,n+1);
K=zeros(n+1,n+1);
f=zeros(1,n+1);
%-----
for i=1:n+1
    t(i)=((i-1)/n)^(3/5);
end
%-----
for i=1:n+1
    f(i)=t(i);
end
%-----
for i=1:n+1
    for j=1:n+1
        R(i,j)=v*exp(-u*abs(t(i)-t(j)));
    end
end
%-----
n1(n)=n;
p1(n)=1/(f*inv(R)*f');
end

```

ANNEXES

```

%-----
plot(n1,p1-l1)
xlabel('taille '), ylabel('VAR - s_{L}^{-2}')
% title('la courbe erreur quadratique moyenne de BLUE- Markov ')
disp('VAR - s^{-2},BLUE- Markov ')
    (p1-l1)'
disp('min de VAR - s^{-2} de BLUE- Markov est ')
min(p1-l1)
    disp('max de VAR - s^{-2} de BLUE- Markov est ')
    max(p1-l1)
        disp('plan optimal')
    t'

%-----estimateur Trapèze-----

m=30;
p2=zeros(1,m);
n2=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
%L=2;
u=1;v=1;
a=zeros(1,2);
b=zeros(1,2);
a(1)=0;a(2)=1;b(1)=-1/(2*u*v);b(2)=(u+1)/(2*u*v);
l1=(6*u*v)/(u^2+3*u+3);
%l=s^2=(u^2+3*u+3)/(6*u*v)
% l1=1/l=(6*u*v)/(u^2+3*u+3);
t=zeros(1,n+3);
z1=zeros(1,n+3);
R=zeros(n+3,n+3);
K=zeros(n+3,n+3);
f=zeros(1,n+3);
%-----
for i=1:n+1
    t(i)=((i-1)/n)^(3/5);
end
t(n+2)=a(1);
t(n+3)=a(2);
%p1=var(b1)
%-----
for i=1:n+1
    f(i)=t(i);
end
f(n+2)=a(1);
f(n+3)=a(2);

```

ANNEXES

```

%-----
for i=1:n+3
    for j=1:n+3
        R(i ,j)= v*exp(-u*abs(t(i)-t(j)));
    end
end
%p2=var(b2)
%-----
%z1=\varphi/ h
for i=1:n+3
z1(i)=(3*u*((t(i))^(1/3)))/(10*v);
end
%-----
for i=1:n+3
    for j=1:n+3
R(i ,j)=v*exp(-u*abs(t(i)-t(j)));
K(i ,j)=z1(i)*R(i ,j)*z1(j);
    end
end
%-----
y=0;
for i=1:n
    for j=1:n
y=y+K(i ,j)+K(i ,j+1)+K(i+1 ,j)+K(i+1 ,j+1);
    end
end
y=y/(4*(n^2));
%-----terme supplémentaire-----
y1=b(1)*b(1)*R(n+2 ,n+2)+b(1)*b(2)*R(n+2 ,n+3)
+b(2)*b(1)*R(n+3 ,n+2)+b(2)*b(2)*R(n+3 ,n+3);
%-----
y2=0;
for i=1:n
    y2=y2+b(1)*(z1(i)*R(i,n+2)+ z1(i+1)*R(i+1,n+2));
end
%-----
y3=0;
for i=1:n
    y3=y3+b(2)*(z1(i)*R(i,n+3)+ z1(i+1)*R(i+1,n+3));
end
y4=(y2+y3)/n;
%-----
y5=y+y1+y4; %y5=var(L_n^{a}(X))
%-----
f1=zeros(1,n+3);
for i=1:n+1

```

ANNEXES

```

    f1(i)=t(i);
end
f1(n+2)=t(n+2);
f1(n+3)=t(n+3);
%-----
g=zeros(1,n);
for i=1:n
    g(i)=z1(i)*f1(i)+z1(i+1)*f1(i+1);
end
%-----
x=0;
for j=1:n
    x=x+g(j);
end
x=x/(2*n)+b(1)*f1(n+2)+b(2)*f1(n+3); %( x=L_n^{a}(f) )
%-----
n2(n)=n;
p2(n)=y5/x^2; %P2=L_n^{a}(X)/L_n^{a}(f)
end
%-----
plot(n2,p2-l1)
xlabel('taille '), ylabel('VAR - s_{L}^{-2}')
%title('la courbe erreur quadratique moyenne
de trapeze- Markov ')
disp('VAR - s^{-2}, trapeze- Markov')
(p2-l1)'
disp('min de VAR - s^{-2} de trapeze- Markov est ')
min(p2-l1)
disp('max de VAR - s^{-2} de trapeze- Markov est ')
max(p2-l1)
disp('plan optimal')
t'
hold off

```

Annexe A7

Cet Annexe donne la graphe de $\text{Var}(\hat{\beta}_{a,n}^{\text{trap}}) - \text{Var}(\hat{\beta}_a)$ correspondant à l'exemple 1.6.2 avec le plan d'échantillonnage optimal régulier pour $\sigma^2 = 1$.

```

clear
clc
close all
%-----BLUE-----
hold on
m=30;
p1=zeros(1,m);
n1=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
%L=1;
%v=1;
c=1;
v=c;
l1=3/4;
t2=zeros(1,n+1);
R2=zeros(n,n);
f2=zeros(1,n);
for i=1:n
    t2(i)=(i)/n;;
end
%p1=var(b1)
%-----
for i=1:n
    f2(i)=t2(i)^2;
end
%-----
for i=1:n
    for j=1:n
        R2(i , j)=v*min(t2(i),t2(j));
    end
end
%-----
n1(n)=n;
p1(n)=1/(f2*inv(R2)*f2');
end
%-----
plot(n1,p1-l1)
xlabel('taille '), ylabel('VAR - s^-2')
title('la courbe erreur quadratique moyenne de BLUE- Markov ')
disp('VAR - s^-2,BLUE- Markov ')
(p1-l1)'

```

ANNEXES

```

disp('min de VAR - s^-2 de BLUE- Markov est ')
min(p1-l1)
disp('max de VAR - s^-2 de BLUE- Markov est ')
max(p1-l1)
disp('plan optimal')
t2'
%-----trapeze-----
m=30;
p2=zeros(1,m);
n2=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
%L=1;
c=1;
v=c;
%phi(t)=-2/v;
a=zeros(1,1);
b=zeros(1,1);
a(1)=1;;b(1)=2/v;
l1=3/4;
%l1=s^2=4/3;
%-----
t=zeros(1,n+1);
z1=zeros(1,n+1);
R=zeros(n+1,n+1);
K=zeros(n+1,n+1);
f=zeros(1,n+1);
%-----
for i=1:n
    t(i)=(i)/n;;
end
t(n+1)=a(1);
%p1=var(b1)
%-----
for i=1:n
    f(i)=t(i)^2;
end
f(n+1)=a(1);
%-----
for i=1:n+1
    for j=1:n+1
        R(i ,j)=v*min(t(i),t(j));
    end
end
%-----
%z1=\varphi/ h

```


ANNEXES

```

for i=1:n+1
    z1(i)=-2/v;
end
%-----
for i=1:n+1
    for j=1:n+1
R(i ,j)=v*min(t(i),t(j));
K(i ,j)=z1(i)*R(i ,j)*z1(j);
    end
end
%-----
y=0;
for i=1:n-1
    for j=1:n-1
y=y+K(i,j)+K(i,j+1)+K(i+1,j)+K(i+1,j+1);
    end
end
y=y/(4*(n^2));
%-----
y1=b(1)*b(1)*R(n+1,n+1);
%-----
y2=0;
for i=1:n-1
    y2=y2+b(1)*(z1(i)*R(i,n+1)+ z1(i+1)*R(i+1,n+1));
end

y4=y2/n;
%-----
y5=y+y1+y4;%y5=var(L_n^{a}(X))
%-----
f1=zeros(1,n+1);
for i=1:n
    f1(i)=t(i)^2;
end
f1(n+1)=t(n+1);
%-----
g=zeros(1,n-1);
for i=1:n-1
    g(i)=z1(i)*f1(i)+z1(i+1)*f1(i+1);
end
%-----
x=0;
for j=1:n-1
    x=x+g(j);
end
x=x/(2*n)+b(1)*f1(n+1); %( x=L_n^{a}(f))

```

ANNEXES

```
%-----  
n2(n)=n;  
p2(n)=y5/(x^2); % P2=L_n^{a}(X)/L_n^{a}(f)  
%s^2=4/3, s^-2=3/4  
end  
%-----  
plot(n2,p2-11)  
xlabel('taille '), ylabel('VAR - s^-2')  
%title('la courbe erreur quadratique moyenne de trapèze- Winer1 '  
title('la courbe erreur quadratique moyenne de trapèze-trapèze  
- Winer1 '  
disp('VAR - s^-2, trapèze_Winer')  
(p2-11)'  
disp('min de VAR - s^-2, trapèze_Winer est '  
min(p2-11)  
disp('max de VAR - s^-2 , trapèze_Winer est '  
max(p2-11)  
disp('plan optimal')  
t'  
hold off
```

Annexe A8

Cet Annexe correspondant aux graphes de l'exemple 2.1.1 des trois variations résiduelles $e_1(n)$, $e_2(n)$, $e_3(n)$ pour plusieurs valeurs de la taille de l'échantillon n où

$$\begin{aligned} e_1(n) &= \text{EQM}(\hat{\beta}_n^{\text{blue}}) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1}), \\ e_2(n) &= \text{EQM}(\hat{\beta}_n^{\text{trap}}) - \text{trace}(\mathbf{S}^{-1}), \\ e_3(n) &= \frac{c^*}{n^2} = \frac{1187}{n^2} \end{aligned}$$

et c^* étant la constante asymptotique du Théorème 2.1.2 avec $\mathbf{M} = \mathbf{I}_q$.

```
clear
clc
close all

hold on
m=110;
%-----BLUE-----
p1=zeros(1,m);
n1=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
t=zeros(1,n);
R=zeros(n,n);
S=zeros(2,2);
%composantes de f
f1=zeros(1,n);%q=2
f2=zeros(1,n);%q=2
%-----
A=zeros(2,2);%la matrice de covariance
du vecteur colonne $\eta$
B=zeros(2,2);% B=R^{-1} inverse de la matrice
de covariance du processus d'erreur $\xi$
%-----
for i=1:n
    t(i)=i/n;
    %-----
end
%p1=var(b1)
%-----
for i=1:n
    f1(i)=t(i)-(t(i)^2)/2;
end
%-----
for i=1:n
```

ANNEXES

```

        f2(i)=- (t(i)^3)/6+(t(i))/2;
end

%-----
S(1,1)=1/(3);
S(1,2)=5/(24);
S(2,1)=5/(24);
S(2,2)=2/15;
w1=trace(inv(S));
%-----
for i=1:n
    for j=1:n
        R(i ,j)=min(t(i),t(j));
    end
end
%-----
B=inv(R); % B=R^{-1} inverse de la matrice de
covariance du processus d'erreur $\xi$
%-----
%Définir les éléments de la matrice $A$
%-----
x11=0;
for i=1:n
    for j=1:n
        x11=x11+f1(i)*B(i,j)*f1(j);
    end
end
A(1,1)=x11;
%-----
x12=0;
for i=1:n
    for j=1:n
        x12=x12+f1(i)*B(i,j)*f2(j);
    end
end
A(1,2)=x12;
%-----
x21=0;
for i=1:n
    for j=1:n
        x21=x21+f2(i)*B(i,j)*f1(j);
    end
end
A(2,1)=x21;
%-----
x22=0;

```

ANNEXES

```

for i=1:n
    for j=1:n
        x22=x22+f2(i)*B(i,j)*f2(j);
    end
end
A(2,2)=x22;
%-----
w3=trace(inv(A));
%w1=trace(inv(S));
%-----
n1(n)=n;
p1(n)=w3;
end
plot(n1,p1-w1)
xlabel('taille '), ylabel('EQM -Trace(S^{-1})')
title('la courbe erreur quadratique moyenne de
trapèze- Winer(q=2) ')
disp('trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)), BLUE_Winer (q=2)')
sprintf('%f \n ', p1-w1 )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
%(p1-w1)'
disp('min de trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)),BLUE_Winer (q=2) est ')
% min(p1-w1)
sprintf('%f \n ',min(p1-w1) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('max de trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)) , BLUE_Winer(q=2) est ')
%max(p1-w1)
sprintf('%f \n ',max(p1-w1) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('plan optimal')
t'

%-----trapèze-----
%m=110;
p2=zeros(1,m);
n2=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
t=zeros(1,n);
%-----
%composantes de z
z1=zeros(1,n);%z1=\varphi 1/ h
z2=zeros(1,n);%z2=\varphi 2/ h

```

ANNEXES

```

R=zeros(n,n);
L=zeros(2,2);
S=zeros(2,2);
%-----
%composantes de K
K1=zeros(n,n);
K2=zeros(n,n);
K3=zeros(n,n);
K4=zeros(n,n);
%-----
%composantes de f
f1=zeros(1,n);%q=2
f2=zeros(1,n);%q=2
%-----
% LA matrice \boldsymbol{S}_{n}^{*}=S1
S1=zeros(2,2);
%-----
for i=1:n
    t(i)=(i)/n;
end
%-----
for i=1:n
    f1(i)=t(i)-(t(i)^2)/2;
end
%-----
for i=1:n
    f2(i)=- (t(i)^3)/6+(t(i))/2;
end

%-----
S(1,1)=1/(3);
S(1,2)=5/(24);
S(2,1)=5/(24);
S(2,2)=2/15;
w1=trace(inv(S));
%-----
for i=1:n
    for j=1:n
        R(i ,j)=min(t(i),t(j));
    end
end
%-----
%z1=\varphi/ h
for i=1:n
    z1(i)=1;
end

```

ANNEXES

```

%-----
%z1=\varphi/ h
for i=1:n
    z2(i)=t(i);
end
%-----
for i=1:n
    for j=1:n
R(i ,j)=min(t(i),t(j));
K1(i ,j)=z1(i)*R(i ,j)*z1(j);
K2(i ,j)=z1(i)*R(i ,j)*z2(j);
K3(i ,j)=z2(i)*R(i ,j)*z1(j);
K4(i ,j)=z2(i)*R(i ,j)*z2(j);
    end
end
%-----
y1=0;
for i=1:n-1
    for j=1:n-1
y1=y1+K1(i,j)+K1(i,j+1)+K1(i+1,j)+K1(i+1,j+1);
    end
end
y1=y1/(4*(n^2));
L(1,1)=y1;
%-----
y2=0;
for i=1:n-1
    for j=1:n-1
y2=y2+K2(i,j)+K2(i,j+1)+K2(i+1,j)+K2(i+1,j+1);
    end
end
y2=y2/(4*(n^2));
L(1,2)=y2;
%-----
y3=0;
for i=1:n-1
    for j=1:n-1
y3=y3+K3(i,j)+K3(i,j+1)+K3(i+1,j)+K3(i+1,j+1);
    end
end
y3=y3/(4*(n^2));
L(2,1)=y3;
%-----
y4=0;
for i=1:n-1
    for j=1:n-1

```

ANNEXES

```

y4=y4+K4(i,j)+K4(i,j+1)+K4(i+1,j)+K4(i+1,j+1);
    end
end
y4=y4/(4*(n^2));
L(2,2)=y4;
%-----
%L=VAR(L_n(X))%
%-----
g1=zeros(1,n-1);
for i=1:n-1
    g1(i)=z1(i)*f1(i)+z1(i+1)*f1(i+1);
end
x1=0;
for j=1:n-1
    x1=x1+g1(j);
end
x1=x1/(2*n); %( x1=L_n(f_{(1,1)}))
S1(1,1)=x1;
%-----
g2=zeros(1,n-1);
for i=1:n-1
    g2(i)=z1(i)*f2(i)+z1(i+1)*f2(i+1);
end
x2=0;
for j=1:n-1
    x2=x2+g2(j);
end
x2=x2/(2*n); %( x2=L_n(f_{(1,2)}))
S1(1,2)=x2;
%-----
g3=zeros(1,n-1);
for i=1:n-1
    g3(i)=z2(i)*f1(i)+z2(i+1)*f1(i+1);
end
x3=0;
for j=1:n-1
    x3=x3+g3(j);
end
x3=x3/(2*n); %( x3=L_n(f_{(2,1)}))
S1(2,1)=x3;
%-----
g4=zeros(1,n-1);
for i=1:n-1
    g4(i)=z2(i)*f2(i)+z2(i+1)*f2(i+1);
end
x4=0;

```


ANNEXES

```

for j=1:n-1
    x4=x4+g4(j);
end
x4=x4/(2*n); %( x=L_n(f_{(2,2)}))
S1(2,2)=x4;
%-----
% S1=\boldsymbol{S}_{n}^{\ast}
w2=trace(inv(S1)*L*inv(S1'));
%-----
n2(n)=n;
p2(n)=w2;
end
%-----
plot(n2,p2-w1)
xlabel('taille '), ylabel('EQM -Trace(S^{-1})')
title('la courbe erreur quadratique moyenne
de trapèze- Winer(q=2) ')
disp('trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)), trapèze_Winer (q=2)')
%(p2-w1)'
sprintf('%f \n ', p2-w1 )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('min de trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)), trapèze_Winer (q=2) est ')
% min(p2-w1)
sprintf('%f \n ',min(p2-w1) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('max de trace(inv(S1)*L*inv(transpose S1))
- trace(inv(S)) , trapèze_Winer (q=2) est ')
%max(p2-w1)
sprintf('%f \n ',max(p2-w1) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('plan optimal')
t'
%disp('n,BLUE, trapèze_Winer (q=2) est ')
%-----constante asymptotique divisée par n^2-----
%m=110;
p3=zeros(1,m);
n3=zeros(1,m);
for n=1:m;
%-----
a=881/25;b=-56;d=89;v=40^2;
n3(n)=n;
p3(n)=(v*(d/3+b+a))/(12*(n^2));
end
%-----

```

ANNEXES

```
plot(n3,p3)
%xlabel('taille '), ylabel('EQM -Trace(S^{-1})')
% title('la courbe erreur quadratique moyenne
de trapèze- Winer(q=2) ')
disp('constant asymptotique divisé par n^2')
%disp([' vecteur constant asymptotique divisé
* par n^2 ', num2str(det(A))])
% p2=round(1000*p2)/1000;
%(p2)'
sprintf('%f \n ', p3 )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('min de constant asymptotique divisé par n^2 ')
%min(p2)
sprintf('%f \n ',min(p3) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
disp('max de constant asymptotique divisé par n^2 ')
% max(p2)
sprintf('%f \n ',max(p3) )% pour imprimer
sans 1.0e+003 *
hold off
```