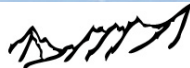




ÉCOLE DE PHYSIQUE
des HOUCHES



Analyse de Sensibilité Globale Approches Stochastiques



Clémentine Prieur

Equipe/projet INRIA MOISE, LJK (Grenoble)

Ecole ASPEN, 6 mai 2014



Positionnement du cours



$\left. \begin{array}{c} X_1 \\ \vdots \\ X_d \end{array} \right\}$

\mathcal{M}

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$$

Cours Plans d'expériences :
planification, échantillonnage



Cours Analyse de Sensibilité :
estimation des indices de sensibilité

Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} \mapsto \mathbf{y} = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} \mapsto y = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \mapsto y = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Plusieurs approches pour l'analyse de sensibilité quantitative :

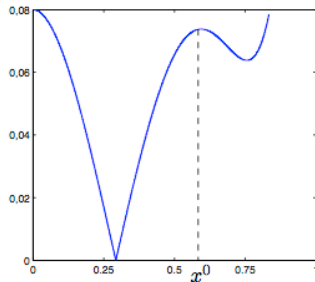
Approches locales :

$\mathcal{M}(\mathbf{x}) \approx \mathcal{M}(\mathbf{x}^0) + \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}^0} (x_i - x_i^0)$ (développement de Taylor).

Indice de sensibilité du premier ordre pour l'entrée i : $\left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}^0}$.

Avantages : moindre coût de calcul, même si d grand (lorsqu'on peut calculer l'adjoint, coût indépendant de la dimension).

Inconvénients : approche locale, qui de plus repose sur une hypothèse de linéarité.



Approches globales :

On attribue au vecteur d'**entrées** une loi de probabilité définie à partir d'avis d'experts, d'observations, ...

ex. : si les entrées sont supposées indépendantes, il suffit de définir des lois marginales.

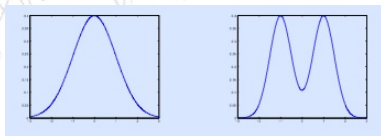


FIGURE : loi (gauche) unimodale, (droite) bimodale

On fait varier les **entrées** selon leur loi de probabilité.

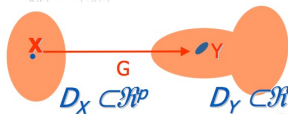


FIGURE : Locale versus Globale ($G := \mathcal{M}$), illustration.

On fait varier les **entrées** selon leur loi de probabilité.

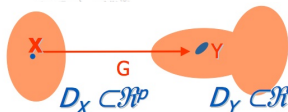


FIGURE : Locale versus Globale ($G := \mathcal{M}$), illustration.

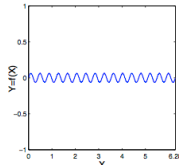
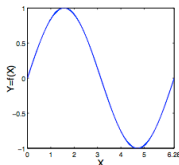
Les approches locales "globalisées" : par ex. (1) $\mathbb{E}_X \left[\left. \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right| \mathbf{x} \right]$, ou (2)

$$\mathbb{E}_X \left[\left(\left. \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right| \mathbf{x} \right)^2 \right].$$

Avantages : particulièrement intéressante si on dispose de l'adjoint (voir exposé Eric Blayo).

Inconvénients :

(1) n'est pas assez discriminant



(2) est connu sous la terminologie **Derivative-based Global Sensitivity Measures**, voir Sobol' & Gresham (1995), Sobol' & Kucherenko (2009).

Cet indice est plus approprié pour du criblage que pour de la hiérarchisation (voir Lamboni *et al.*, 2013).

Ce cours est dédié aux approches globales permettant de hiérarchiser efficacement les facteurs d'entrée.

Mesures de sensibilité, définition, estimation

- I- Mesures fondées sur la régression linéaire.
- II- Analyse de la variance fonctionnelle.
- III- Estimation des indices de Sobol
 - par méthodes type Monte Carlo et variantes,
 - par méthodes spectrales.
- IV- Indices *distributionnels*.
- V- Extensions.

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

- Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- Coeff. de corrélation partielle

$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \hat{Y}^{-(i)}, X_i - \hat{X}_i^{-(i)}\right)$$

Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont indépendantes, $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;
- si les entrées sont corrélées, les PCC sont plus appropriés.

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

- Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- Coeff. de corrélation partielle

$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \hat{Y}^{-(i)}, X_i - \hat{X}_i^{-(i)}\right)$$

Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont **indépendantes**, $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;
- si les entrées sont **corrélées**, les PCC sont plus appropriés.

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

- Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- Coeff. de corrélation partielle

$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \hat{Y}^{-(i)}, X_i - \hat{X}_i^{-(i)}\right)$$

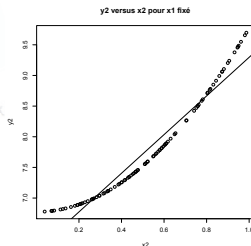
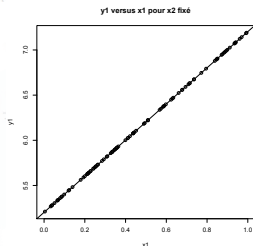
Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont **indépendantes**, $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;
- si les entrées sont **corrélées**, les PCC sont plus appropriés.

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

Validité du modèle linéaire ?

Un exemple jouet : $Y = 2X_1 + 3X_2^2 + 5$, $X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $i = 1, 2$, $X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$.



On peut approcher ce modèle par un modèle linéaire :

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_0 + \varepsilon, \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

Echantillon d'apprentissage : $y_k = \mathcal{M}(x_{1,k}, \dots, x_{d,k})$, $k = 1, \dots, 100$

$$\Rightarrow \hat{y} = \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_0 = 2.06x_1 + 3.15x_2 + 4.34.$$

Quelles mesures pour quantifier la qualité de ce modèle ?

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

★ Coefficient R^2

$$R^2 = \frac{SCE}{SCT} = \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k - \bar{y})^2}{\sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i x_{i,k}, \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k.$$

★ Erreur de prédiction, par exemple par validation croisée :

$$V_i = \frac{1}{m} \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k^{-(k)} - y_k)^2}{\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$\hat{y}_k^{-(k)} = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i^{-(k)} x_{i,k}$, $\hat{\beta}_i^{-(k)}$ estimé à partir de

$$(y_j, \mathbf{x}_j), j = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, m.$$

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

★ Coefficient R^2

$$R^2 = \frac{SCE}{SCT} = \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k - \bar{y})^2}{\sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i x_{i,k}, \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k.$$

★ Erreur de prédiction, par exemple par validation croisée :

$$\frac{1}{m} \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k^{-(k)} - y_k)^2}{\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k^{-(k)} = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i^{-(k)} x_{i,k}, \hat{\beta}_i^{-(k)} \text{ estimé à partir de}$$

$$(y_j, \mathbf{x}_j), j = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, m.$$

I- Mesures fondées sur la régression linéaire

Si la relation **entrées/sortie** n'est plus linéaire mais monotone, on travaille sur les rangs.

$y_k, x_{i,k}, k = 1, \dots, m, i = 1, \dots, d$

$r_{i,k}$ rang de $x_{i,k}$ dans $(x_{i,1}, \dots, x_{i,m})$, r_k rang de y_k dans (y_1, \dots, y_m)

$$\bullet \rho_i^S = \frac{\sum_{k=1}^m (r_{i,k} - \bar{r}_i)(r_k - \bar{r})}{\sqrt{\sum_{k=1}^m (r_{i,k} - \bar{r}_i)^2} \sqrt{\sum_{k=1}^m (r_k - \bar{r})^2}}$$

• idem pour pcc_i

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Rappels d'ANOVA

Y quantité d'intérêt, X_1 (resp. X_2) facteur qualitatif à I (resp. J) niveaux.

modèle : $Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{i,j} + \varepsilon_{ij}$, ε_{ij} i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

contraintes d'identifiabilité : $\sum_{i=1}^I \alpha_i = 0$, $\sum_{j=1}^J \beta_j = 0$, $\sum_{i=1}^I \gamma_{ij} = 0$,
 $\sum_{j=1}^J \gamma_{ij} = 0$.

Estimation des effets :

plan complet, équilibré, avec $r > 1$ répétitions $\rightarrow y_{ijk}$, $k = 1, \dots, r$

$$\hat{\mu} = \bar{y}, \quad \hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i..} - \bar{y}, \quad \hat{\beta}_j = \bar{y}_{.j.} - \bar{y}, \quad \hat{\gamma}_{ij} = \bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y},$$

avec les notations usuelles $\bar{y} = \frac{1}{IJr} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r y_{ijk}$,

$$\bar{y}_{i..} = \frac{1}{Jr} \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{.j.} = \frac{1}{Ir} \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{ij.} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r y_{ijk}.$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Dans le modèle précédent, on définit :

- les prévisions $\hat{y}_{ijk} = \bar{y}_{ij.}$,
- les résidus $\hat{\epsilon}_{ijk} = y_{ijk} - \hat{y}_{ijk} = y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}$.

Décomposition de la variance

$$SCY_{\text{obs}} = F_{\text{obs}} = V_1 + \dots + V_n \quad \text{variance totale} = SCM + SCR$$

variance totale = variance expl. par le modèle + variance résiduelle

$$V_1 = \text{Var}[E(Y | X_1)] = SCX_1 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (\bar{y}_{i..} - \bar{y})^2, \quad \text{avec}$$

$$V_{1,2} = \text{Var}[E(Y | X_1, X_2)] = SCX_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - \bar{y})^2,$$

$$SCX_1 X_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y})^2,$$

$$SCR = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - y_{ijk})^2.$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Dans le modèle précédent, on définit :

- les prévisions $\hat{y}_{ijk} = \bar{y}_{ij.}$,
- les résidus $\hat{\epsilon}_{ijk} = y_{ijk} - \hat{y}_{ijk} = y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}$.

Décomposition de la variance :

$$\begin{aligned} SCT &= SCM + SCR \\ \text{variance totale} &= \text{variance expl. par le modèle} + \text{variance résiduelle} \end{aligned}$$

$$SCM = SCX_1 + SCX_2 + SCX_1 X_2 \quad \text{avec}$$

$$SCX_1 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{i..} - \bar{y})^2, \quad SCX_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{.j.} - \bar{y})^2,$$

$$SCX_1 X_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y})^2,$$

$$SCR = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - y_{ijk})^2.$$

Tests d'hypothèse : plusieurs tests possibles.

ex. : H_0 : modèle additif contre H_1 : modèle complet

Statistique de test :

$$T = \frac{SCX_1X_2/(IJ - I - J + 1)}{SCR/(IJr - IJ)} \underset{H_0}{\sim} F(IJ - I - J + 1, IJr - IJ).$$

Hypothèses sous-jacentes au modèle d'ANOVA :

- les **facteurs** n'influencent que la moyenne de la variable quantitative Y et pas sa variance ;
- les variations autres que celles provoquées par les facteurs sont gaussiennes et indépendantes.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(s, t) = \mathcal{M}(s, t) + \varepsilon(s, t), \quad (s, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(s, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(s, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$\mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- les X_i sont indépendantes ;
- $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(s, t) = \mathcal{M}(s, t) + \varepsilon(s, t), \quad (s, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(s, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(s, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), \quad (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- les X_i sont indépendantes ;
- $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(s, t) = \mathcal{M}(s, t) + \varepsilon(s, t), \quad (s, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(s, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(s, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), \quad (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- les X_i sont indépendantes ;
- $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Dans la suite on supposera :

- i) les X_i sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

L'hypothèse ii) n'est pas restrictive : par la méthode d'inversion, $Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$ s'écrit

$$Y = \mathcal{M}(F_{X_1}^{-1}(U_1), \dots, F_{X_d}^{-1}(U_d)) = \widetilde{\mathcal{M}}(U_1, \dots, U_d)$$

avec $U_i, i = 1, \dots, d$ indépendantes, et pour tout $i, U_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $F_{X_i}^{-1}$ inverse généralisée de la fonction de répartition de X_i .

Le cas des entrées corrélées, beaucoup plus complexe, sera discuté à la fin de ce cours.

Dans la suite on supposera :

- i) les X_i sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

L'hypothèse ii) n'est pas restrictive : par la méthode d'inversion, $Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$ s'écrit

$$Y = \mathcal{M}(F_{X_1}^{-1}(U_1), \dots, F_{X_d}^{-1}(U_d)) = \widetilde{\mathcal{M}}(U_1, \dots, U_d)$$

avec $U_i, i = 1, \dots, d$ indépendantes, et pour tout i , $U_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $F_{X_i}^{-1}$ inverse généralisée de la fonction de répartition de X_i .

Le cas des entrées corrélées, beaucoup plus complexe, sera discuté à la fin de ce cours.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des **entrées** ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des **entrées** ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] + \mathbb{E}[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] + \mathbb{E}[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] + \mathbb{E}[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$$i = 1, \dots, d$$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2, \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = \mathbb{E}(X_1^2 + X_2|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2 + X_2|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2 + X_2) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2, \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_1)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_2)) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2, \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_1)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_2)) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2, \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2, \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Plus généralement,

Théorème (Décomposition de Hoeffding)

$$\mathcal{M} : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}, \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty$$

\mathcal{M} admet une unique décomposition de la forme

$$\mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} \mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) + \dots + \mathcal{M}_{1,\dots,d}(x_1, \dots, x_d)$$

sous les contraintes

- \mathcal{M}_0 constante,
- $\forall 1 \leq s \leq d, \forall 1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq d, \forall 1 \leq p \leq s$

$$\int_0^1 \mathcal{M}_{i_1,\dots,i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_p} = 0$$

Conséquences : $M_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- $M_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - M_0$
- $i \neq j$ $M_{ij}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - M_0 - M_i(x_i) - M_j(x_j)$

Calcul d'intégrales multiples.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- $i \neq j \quad \mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$

Calcul d'intégrales multiples.

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- $i \neq j \quad \mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$
- ...

Calcul d'intégrales multiples.

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- $i \neq j \quad \mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$
- ...

Calcul d'intégrales multiples.

Décomposition de la variance : X_1, \dots, X_d i.i.d. $\sim \mathcal{U}([0, 1])$

$$Y = \mathcal{M}(X) = \mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(X_i) + \dots + \mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d)$$

- $\mathcal{M}_0 = \mathbb{E}(Y)$,
- $\mathcal{M}_i(X_i) = \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y)$,
- $i \neq j$ $\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j) = \mathbb{E}(Y|X_i, X_j) - \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y|X_j) + \mathbb{E}(Y)$,
- ...

$$\text{Var}(Y) = \sum_{i=1}^d \text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i)) + \dots + \text{Var}(\mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d))$$

Décomposition de la variance : X_1, \dots, X_d i.i.d. $\sim \mathcal{U}([0, 1])$

$$Y = \mathcal{M}(X) = \mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(X_i) + \dots + \mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d)$$

- $\mathcal{M}_0 = \mathbb{E}(Y)$,
- $\mathcal{M}_i(X_i) = \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y)$,
- $i \neq j$ $\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j) = \mathbb{E}(Y|X_i, X_j) - \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y|X_j) + \mathbb{E}(Y)$,
- ...

$$\text{Var}(Y) = \sum_{i=1}^d \text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i)) + \dots + \text{Var}(\mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d))$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall i = 1, \dots, d \quad S_i = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)}$$

$$\forall i \neq j \quad S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i, X_j)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_j)]}{\text{Var}(Y)}$$

...

$$1 = \sum_{i=1}^d S_i + \sum_{i \neq j} S_{i,j} + \dots + S_{1,\dots,d}$$

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{u \subset \{1, \dots, d\}, u \neq \emptyset, i \in u} S_u$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall i = 1, \dots, d \quad S_i = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)}$$

$$\forall i \neq j \quad S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i, X_j)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_j)]}{\text{Var}(Y)}$$

...

$$1 = \sum_{i=1}^d S_i + \sum_{i \neq j} S_{i,j} + \dots + S_{1,\dots,d}$$

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}, \mathbf{u} \neq \emptyset, i \in \mathbf{u}} S_{\mathbf{u}} .$$

II- Analyse de la variance fonctionnelle

Indices de Sobol' :

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}, \mathbf{u} \neq \emptyset, i \in \mathbf{u}} S_{\mathbf{u}} .$$

$$X_{(-i)} = (X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_d)$$

En utilisant le théorème de la variance totale,

$$S_{T_i} = \frac{\mathbb{E} [\text{Var} (Y | X_{(-i)})]}{\text{Var}(Y)} = 1 - \frac{\text{Var} [\mathbb{E} (Y | X_{(-i)})]}{\text{Var}(Y)} .$$

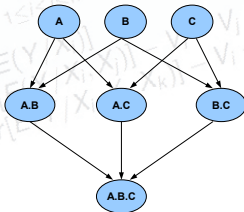
II- Analyse de la variance fonctionnelle

Indices par facteur :

Effets
principaux

Interactions
2 facteurs

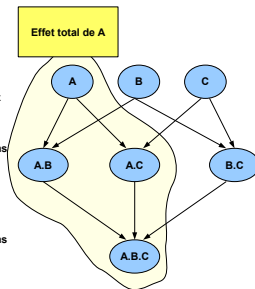
Interactions
3 facteurs



Effets
principaux

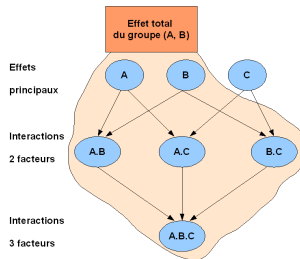
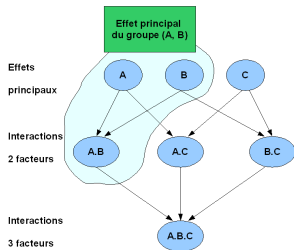
Interactions
2 facteurs

Interactions
3 facteurs



II- Analyse de la variance fonctionnelle

Indices par groupe de facteurs :



III- Estimation des indices de Sobol

Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique (voir cours Robert Faivre), métamodélisation par processus gaussien (voir cours Sébastien Da Veiga).

III- Estimation des indices de Sobol

Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique (voir cours Robert Faivre), métamodélisation par processus gaussien (voir cours Sébastien Da Veiga).

III- Estimation des indices de Sobol

Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique (voir cours Robert Faivre), métamodélisation par processus gaussien (voir cours Sébastien Da Veiga).

III- Estimation des indices de Sobol

Approches type Monte-Carlo : (Sobol' 93, Saltelli 02, Mauntz, ...)

Idée : $X'_{(-i)}$ copie indép. de $X_{(-i)}$, $Y = \mathcal{M}(X_i, X_{(-i)})$, $Y^i = \mathcal{M}(X_i, X'_{(-i)})$

On a $S_i = \frac{\text{Cov}(Y, Y^i)}{\text{Var}(Y)}$, l'idée est d'avoir une formule empirique.

2 échantillonnages A et B (Monte-Carlo, LHS) indépendants.

$$A = \begin{pmatrix} x_{1,1}^A & \cdots & x_{d,1}^A \\ \vdots & & \vdots \\ x_{1,n}^A & \cdots & x_{d,n}^A \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} x_{1,1}^B & \cdots & x_{d,1}^B \\ \vdots & & \vdots \\ x_{1,n}^B & \cdots & x_{d,n}^B \end{pmatrix}$$

A partir de A et de B, on crée d matrices d'échantillonnage C_i , $i = 1, \dots, d$.

$$C_i = \begin{pmatrix} x_{1,1}^A & \cdots & x_{i,1}^B & \cdots & x_{d,1}^A \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{1,n}^A & \cdots & x_{i,n}^B & \cdots & x_{d,n}^A \end{pmatrix}$$

III- Estimation des indices de Sobol

On évalue $(2 + d) \times n$ le modèle \mathcal{M} :

$$y^A = \begin{pmatrix} y_1^A \\ \vdots \\ y_n^A \end{pmatrix} \quad y^B = \begin{pmatrix} y_1^B \\ \vdots \\ y_n^B \end{pmatrix} \quad \forall 1 \leq i \leq d \quad y^{C_i} = \begin{pmatrix} y_1^{C_i} \\ \vdots \\ y_n^{C_i} \end{pmatrix}$$

sobol2007()

- $\hat{V}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} y_k^B (y_k^{C_i} - y_k^A)$ numérateur indice d'ordre 1
- $V - \hat{V}_{\sim i} \approx \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n y_k^A (y_k^A - y_k^B) - \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n y_k^A (y_k^{C_i} - y_k^B)$
 $= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^A (y_k^A - y_k^{C_i})$ numérateur indice total
- $\hat{V} = \frac{n}{n-1} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (y_k^A)^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^A \right)^2 \right)$ dénominateur

intervalles de confiance par bootstrap

III- Estimation des indices de Sobol

sobolEff () (Janon *et al.*, 2012 & 2013)

- $\hat{V}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^B y_k^{C_i} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ numérateur indice d'ordre 1

- $\hat{V} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{(y_k^B)^2 + (y_k^{C_i})^2}{2} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ dénominateur

intervalles de confiance asymptotiques,
estimateur asymptotiquement efficace

Remarque :

On peut aussi remplacer les échantillonnages MC ou LHS par du QMC (hyp. de variations régulières).

III- Estimation des indices de Sobol

sobolEff () (Janon *et al.*, 2012 & 2013)

- $\hat{V}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^B y_k^{C_i} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ numérateur indice d'ordre 1

- $\hat{V} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{(y_k^B)^2 + (y_k^{C_i})^2}{2} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ dénominateur

intervalles de confiance asymptotiques,

estimateur asymptotiquement efficace

Remarque :

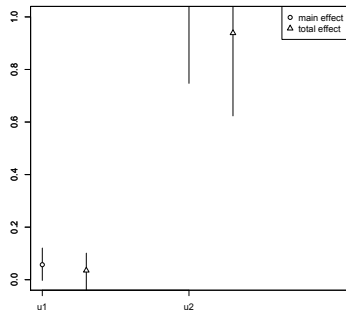
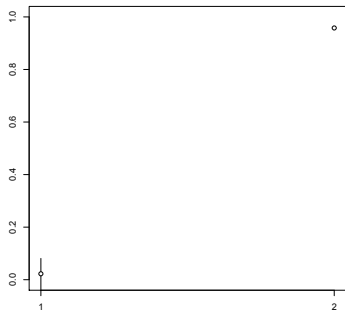
On peut aussi remplacer les échantillonnages MC ou LHS par du QMC (hyp. de variations régulières).

III- Estimation des indices de Sobol

La g -fonction de Sobol' : $f(x) = f_1(x_1) * f_2(x_2)$ avec $f_i(x_i) = \frac{|4x_i - 2| + a_i}{1 + a_i}$, $a_1 = 9$, $a_2 = 1$.

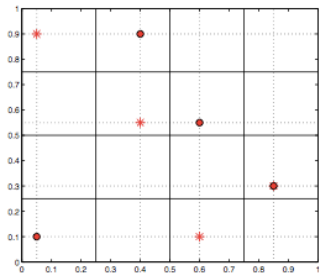
$S_1 \approx 0.038$, $S_2 \approx 0.958$.

$n = 1000$, $b = 100$, IC(0.95) sobolEff (gauche), sobol2007 (droite)



III- Estimation des indices de Sobol

Hypercubes latins répliqués : (Tissot *et al.*)



Définition (Replicated Latin Hypercube Sampling)

$k = 1, \dots, n$

$$\mathbf{x}_k = \left(\frac{\pi_1(k) - U_{1,\pi_1(k)}}{n}, \dots, \frac{\pi_d(k) - U_{d,\pi_d(k)}}{n} \right)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_k = \left(\frac{\tilde{\pi}_1(k) - U_{1,\tilde{\pi}_1(k)}}{n}, \dots, \frac{\tilde{\pi}_d(k) - U_{d,\tilde{\pi}_d(k)}}{n} \right)$$

On dispose de deux matrices B et \tilde{B} .

III- Estimation des indices de Sobol

$$B = \begin{pmatrix} X_{1,1} & \dots & X_{d,1} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{1,n} & \dots & X_{d,n} \end{pmatrix} \quad \tilde{B} = \begin{pmatrix} \tilde{X}_{1,1} & \dots & \tilde{X}_{d,1} \\ \vdots & & \vdots \\ \tilde{X}_{1,n} & \dots & \tilde{X}_{d,n} \end{pmatrix}$$

On évalue le modèle \mathcal{M} $2n$ fois (sur les n lignes de B et les n lignes de \tilde{B}).

permut. des lignes : $\begin{cases} \tilde{B} = (\tilde{x}_{k,l})_{1 \leq k \leq n, 1 \leq l \leq d} & \rightarrow \tilde{B}_i = (\tilde{x}_{k,l}^i)_{1 \leq k \leq n, 1 \leq l \leq d} \\ L_k & \mapsto L_{\pi_i^{-1} \circ \tilde{\pi}_i(k)}, k = 1, \dots, n \end{cases}$

Alors, $\tilde{x}_{k,i}^i = \tilde{x}_{\tilde{\pi}_i^{-1} \circ \pi_i(k), i} = x_{k,i}, k = 1, \dots, n$.

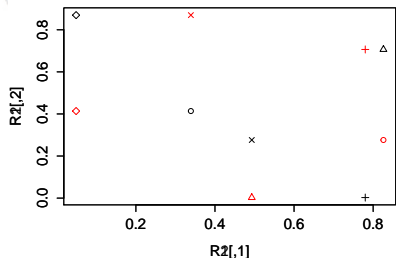
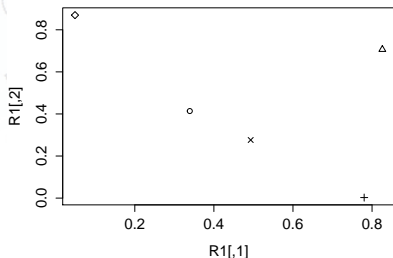
Pour l'estimation de S_i on remplace C_i par \tilde{B}_i (même colonne numéro i).

III- Estimation des indices de Sobol

Légende :

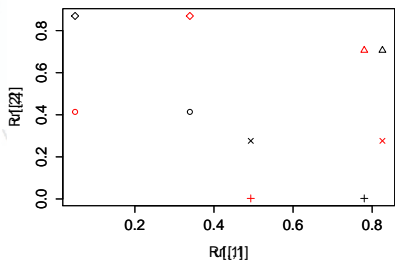
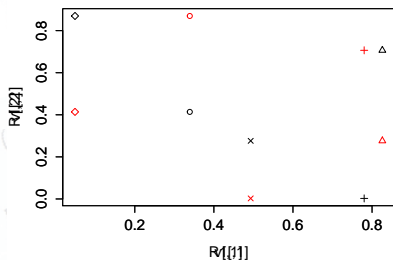
point 1 ○ point 2 △ point 3 + point 4 × point 5 ◇

Plans B (gauche), B et \tilde{B} (droite, noir et rouge)



III- Estimation des indices de Sobol

Plans \tilde{B}_1 (gauche), \tilde{B}_2 (droite)

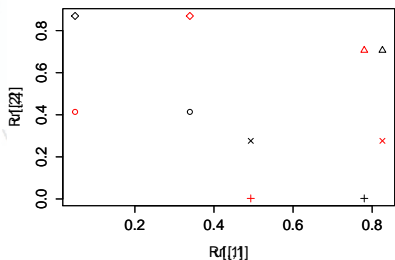
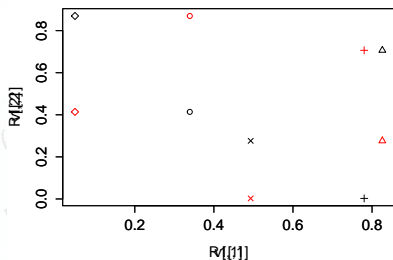


Intervalle de confiance asymptotiques, variance plus petite que pour MC.

Généralisation possible aux indices d'ordre 2 (via des tableaux orthogonaux de force 2).

III- Estimation des indices de Sobol

Plans \tilde{B}_1 (gauche), \tilde{B}_2 (droite)



Intervalle de confiance asymptotiques, variance plus petite que pour MC.

Généralisation possible aux indices d'ordre 2 (via des tableaux orthogonaux de force 2).

III- Estimation des indices de Sobol

Approches spectrales : (cas $d = 2$) $Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1,k_2) \in \mathbb{Z}^2} c_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2)$

avec, pour tout $i = 1, 2$, $(\Phi_{i,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ est une b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i,0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_{0,0}(\mathcal{M}), \mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,0}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1), \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2,k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1,k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1,k_2) \neq (0,0)} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$) $Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1,k_2) \in \mathbb{Z}^2} c_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2)$

avec, pour tout $i = 1, 2$, $(\Phi_{i,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ est une b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i,0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,0}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2,k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

$$\bullet \text{ Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,0}(\mathcal{M})|^2, \text{ (idem pour } \sigma_2^2),$$

$$\bullet \text{ Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2,$$

$$\bullet \text{ Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1,k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1,k_2) \neq (0,0)} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2.$$

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$) $Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1,k_2) \in \mathbb{Z}^2} c_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2)$

avec, pour tout $i = 1, 2$, $(\Phi_{i,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ est une b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i,0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,0}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2,k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1,k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1,k_2) \neq (0,0)} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$) $Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1,k_2) \in \mathbb{Z}^2} c_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2)$

avec, pour tout $i = 1, 2$, $(\Phi_{i,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ est une b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i,0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,0}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2,k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1,k_1}(X_1) \Phi_{2,k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1,k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1,k_2) \neq (0,0)} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, **base de Fourier**.

III- Estimation des indices de Sobol

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card} D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

(On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- $\hat{\sigma}_{0,0}^2(\mathcal{M}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{0,0}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{0,0} \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini,
- (idem pour $\hat{\sigma}_{1,2}^2$),
- $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

III- Estimation des indices de Sobol

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card} D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

III- Estimation des indices de Sobol

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card}D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

III- Estimation des indices de Sobol

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card} D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

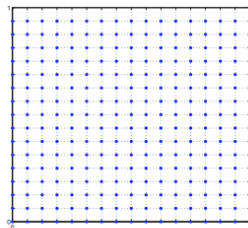
On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

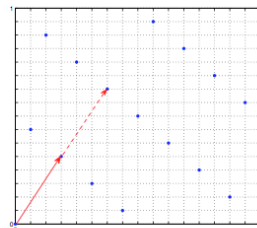
$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

III- Estimation des indices de Sobol

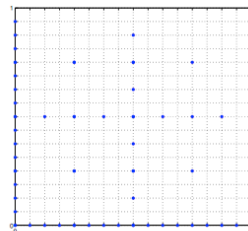
Quelques plans classiques :



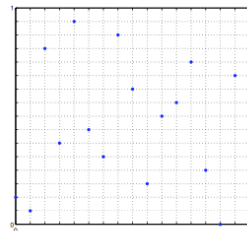
(a) grille régulière



(b) sous-groupe fini



(c) grille creuse



(d) tableau orthogonal

III- Estimation des indices de Sobol

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Gaukier et al., 1978) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous-groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature

Remarques

- pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- pour les indices totaux `fast99()` (pas de contrôle d'erreur) Saltelli et al., 99.

III- Estimation des indices de Sobol

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Cukier *et al.*, 78) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature.

Remarques

- pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- pour les indices totaux `fast99()` (pas de contrôle d'erreur) Saltelli *et al.*, 99.

III- Estimation des indices de Sobol

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Cukier *et al.*, 78) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature.

Remarques :

- pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- pour les indices totaux `fast99()` (pas de contrôle d'erreur) Saltelli *et al.*, 99.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$) ;
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques

- ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$) ;
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques :

- ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$) ;
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques :

- ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

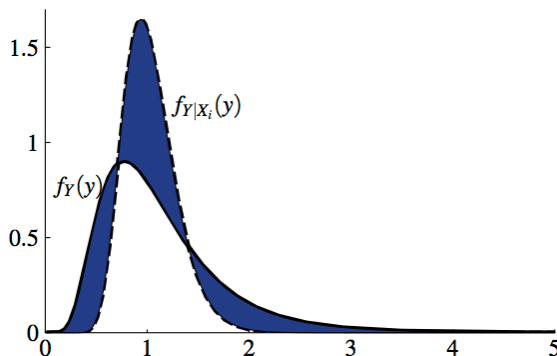
L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Borgonovo *et al.* ≥ 2007

$$\delta_i = \frac{1}{2} \mathbb{E}_{X_i} (S_i(X_i)) \text{ avec } S_i(X_i) = \int |f_Y(y) - f_{Y|X_i}(y)| dy.$$

Remarque : généralisable à $\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}$



- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux (voir cours R. Faivre, S. Da Veiga, exposés B. Sudret et G. Poette) ;
- entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique (voir exposé N. Saint Georges pour entrées spatiales) ;
- sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni et al., appelés indices agrégés dans l'exposé de N. Saint Georges)
- sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale), d'indices ;
- entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- * on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux (voir cours R. Faivre, S. Da Veiga, exposés B. Sudret et G. Poette) ;
- * entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique (voir exposé N. Saint Geours pour entrées spatiales) ;
- * sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni et al., appelés indices agrégés dans l'exposé de N. Saint Geours)
- * sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale), d'indices ;
- * entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux (voir cours R. Faivre, S. Da Veiga, exposés B. Sudret et G. Poette) ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique (voir exposé N. Saint Geours pour entrées spatiales) ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*, appelés indices agrégés dans l'exposé de N. Saint Geours) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux (voir cours R. Faivre, S. Da Veiga, exposés B. Sudret et G. Poette) ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique (voir exposé N. Saint Geours pour entrées spatiales) ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*, appelés indices agrégés dans l'exposé de N. Saint Geours) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux (voir cours R. Faivre, S. Da Veiga, exposés B. Sudret et G. Poette) ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique (voir exposé N. Saint Geours pour entrées spatiales) ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*, appelés indices agrégés dans l'exposé de N. Saint Geours) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

Quelques références I



A. Antoniadis.

Analysis of variance on function spaces.

Math. Oper. Forsch. und Statist., series Statistics, 15(1) :59–71, 1984.



E. Borgonovo.

A new uncertainty importance measure.

Reliability Engineering and System Safety, 92(6) :771–784, 2007.



R. I. Cukier, C. M. Fortuin, K. E. Shuler, A. G. Petschek, and J. H. Schaibly.

Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients : Theory.

Journal of Chemical Physics, 59 :3873–3878, 1973.



R. I. Cukier, H. B. Levine, and K. E. Shuler.

Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems.

Journal of Computational Physics, 26 :1–42, 1978.



R. I. Cukier, J. H. Schaibly, and K. E. Shuler.

Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients : Analysis of the approximations.

Journal of Chemical Physics, 63 :1140–1149, 1975.



F. Gamboa, A. Janon, T. Klein, A. Lagnoux, and C. Prieur.

Statistical inference for sobol pick freeze monte carlo method.

<http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00804668>, 2013+.

Quelques références II



W. F. Hoeffding.

A class of statistics with asymptotically normal distributions.

Annals of Mathematical Statistics, 19 :293–325, 1948.



Bertrand Iooss.

Revue sur l'analyse de sensibilité globale de modèles numériques.

Journal de la Société Française de Statistique, 152(1) :3–25, 2011.



M. Lamboni, B. Iooss, A.-L. Popelin, and F. Gamboa.

Derivative-based global sensitivity measures : general links with Sobol' indices and numerical tests.

Mathematics and Computers in Simulation, 87 :45–54, 2013.



M. Lamboni, H. Monod, and D. Makowski.

Multivariate sensitivity analysis to measure global contribution of input factors in dynamic models.

Reliability Engineering and System Safety, 96(4) :450–459, 2011.



W. Mauntz.

Global sensitivity analysis of general nonlinear systems.

Master's Thesis, Imperial College. Supervisors : C. Pantelides and S. Kucherenko, 2002.



A. Saltelli.

Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices.

Computer Physics Communications, 145 :280–297, 2002.



A. Saltelli, K. Chan, and E. M. Scott.

Sensitivity Analysis.

John Wiley & Sons, 2000.

Quelques références III



I. M. Sobol'.

Sensitivity analysis for nonlinear mathematical models.

Mathematical Modeling and Computational Experiment, 1 :407–414, 1993.



I. M. Sobol' and A Gresham.

On an alternative global sensitivity estimators.

Proceedings of SAMO, Belgirate, pages 40–42, 1995.



I. M. Sobol' and S. Kucherenko.

Derivative based global sensitivity measures and the link with global sensitivity indices.

Mathematics and Computers in Simulation, 79 :3009–3017, 2009.



S. Tarantola, D. Gatelli, and T. A. Mara.

Random balance designs for the estimation of first-order global sensitivity indices.

Reliability Engineering and System Safety, 91 :717–727, 2006.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

Bias correction for the estimation of sensitivity indices based on random balance designs.

Reliability Engineering and System Safety, 107 :205–213, 2012.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

Estimating Sobol' indices combining Monte Carlo estimators and Latin hypercube sampling.

<http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00743964>, 2012+.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

Variance-based sensitivity analysis using harmonic analysis.

<http://hal.archives-ouvertes.fr/docs/00/68/07/25/PDF>, 2012+.