

Analyse d'incertitudes et de sensibilité

Application aux modèles de cinétique chimique

Sébastien DA-VEIGA



Directeurs de thèse : Fabrice GAMBOA
Anestis ANTONIADIS

LSP Toulouse
IMAG Grenoble

Promoteur IFP : François WAHL

IFP-Lyon

- 1 Modélisation d'un système physique et incertitudes
- 2 Analyse d'incertitudes
- 3 Analyse de sensibilité
- 4 Conclusions et perspectives

- 1 Modélisation d'un système physique et incertitudes
- 2 Analyse d'incertitudes
- 3 Analyse de sensibilité
- 4 Conclusions et perspectives

- Phénomène physique, chimique, économique : modélisation
Sorties, variables d'entrées, paramètres, etc.
- Confiance du modèle ?
 - Entrées incertaines
 - Paramètres incertains
 - Incertitudes de modèle

Question centrale

Quel est l'impact sur les sorties du modèle ?

- Un cadre mathématique adapté : **cadre probabiliste**
 - Incertitudes sur les entrées représentées par une loi de probabilité
 - Loi de probabilité sur la sortie

- Phénomène physique, chimique, économique : modélisation
Sorties, variables d'entrées, paramètres, etc.
- Confiance du modèle ?
 - Entrées incertaines
 - Paramètres incertains
 - Incertitudes de modèle

Question centrale

Quel est l'impact sur les sorties du modèle ?

- Un cadre mathématique adapté : **cadre probabiliste**
 - Incertitudes sur les entrées représentées par une loi de probabilité
 - Loi de probabilité sur la sortie

- Phénomène physique, chimique, économique : modélisation
Sorties, variables d'entrées, paramètres, etc.
- Confiance du modèle ?
 - Entrées incertaines
 - Paramètres incertains
 - Incertitudes de modèle

Question centrale

Quel est l'impact sur les sorties du modèle ?

- Un cadre mathématique adapté : **cadre probabiliste**
 - Incertitudes sur les entrées représentées par une loi de probabilité
 - Loi de probabilité sur la sortie

Deux interrogations

- Si les entrées sont représentées par une loi de probabilité, quelle est la loi de probabilité des sorties ?

Analyse d'incertitudes

- Parmi les entrées, quelles sont celles qui ont le plus d'influence sur une sortie donnée ?

Analyse de sensibilité

Deux interrogations

- Si les entrées sont représentées par une loi de probabilité, quelle est la loi de probabilité des sorties ?

Analyse d'incertitudes

- Parmi les entrées, quelles sont celles qui ont le plus d'influence sur une sortie donnée ?

Analyse de sensibilité

Deux interrogations

- Si les entrées sont représentées par une loi de probabilité, quelle est la loi de probabilité des sorties ?

Analyse d'incertitudes

- Parmi les entrées, quelles sont celles qui ont le plus d'influence sur une sortie donnée ?

Analyse de sensibilité

Deux interrogations

- Si les entrées sont représentées par une loi de probabilité, quelle est la loi de probabilité des sorties ?

Analyse d'incertitudes

- Parmi les entrées, quelles sont celles qui ont le plus d'influence sur une sortie donnée ?

Analyse de sensibilité

Deux interrogations

- Si les entrées sont représentées par une loi de probabilité, quelle est la loi de probabilité des sorties ?

Analyse d'incertitudes

- Parmi les entrées, quelles sont celles qui ont le plus d'influence sur une sortie donnée ?

Analyse de sensibilité

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

- Le problème posé en cinétique chimique
- Le bootstrap
- Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse
- Markov Chain Monte Carlo
- Conclusions sur l'analyse d'incertitudes

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

- Le problème posé en cinétique chimique
- Le bootstrap
- Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse
- Markov Chain Monte Carlo
- Conclusions sur l'analyse d'incertitudes

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Y : sorties

e.g. fractions molaires des produits

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Y : sorties

e.g. fractions molaires des produits

c : entrées + conditions opératoires

e.g. fractions molaires des réactifs + P, T, ...

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Y : sorties

e.g. fractions molaires des produits

c : entrées + conditions opératoires

e.g. fractions molaires des réactifs + P, T, ...

θ_0 : *vrais* paramètres cinétiques inconnus

e.g. constantes pré-exponentielles, énergies d'activation, ...

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Y : sorties

e.g. fractions molaires des produits

c : entrées + conditions opératoires

e.g. fractions molaires des réactifs + P, T, ...

θ_0 : *vrais* paramètres cinétiques inconnus

e.g. constantes pré-exponentielles, énergies d'activation, ...

f : fonction modélisant la réaction

e.g. solution d'un système d'EDO (résolu numériquement)

Procédés chimiques habituellement modélisés par un **modèle de régression non-linéaire**

$$Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$$

Y : sorties

e.g. fractions molaires des produits

c : entrées + conditions opératoires

e.g. fractions molaires des réactifs + P, T, ...

θ_0 : **vrais paramètres cinétiques inconnus**

e.g. constantes pré-exponentielles, énergies d'activation, ...

f : fonction modélisant la réaction

e.g. solution d'un système d'EDO (résolu numériquement)

Problématique

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- θ_0 estimé par

$$\hat{\theta}_n = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Utilisation classique : prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Bruit de mesure $\Rightarrow \hat{\theta}_n$ aléatoire $\Rightarrow \hat{Y}$ aléatoire
- Objectif : quantifier l'incertitude sur \hat{Y}
- **Comment : identifier d'abord la loi de $\hat{\theta}_n$**

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- θ_0 estimé par

$$\hat{\theta}_n = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Utilisation classique : prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Bruit de mesure $\Rightarrow \hat{\theta}_n$ aléatoire $\Rightarrow \hat{Y}$ aléatoire
- Objectif : quantifier l'incertitude sur \hat{Y}
- Comment : identifier d'abord la loi de $\hat{\theta}_n$

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- θ_0 estimé par

$$\hat{\theta}_n = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Utilisation classique : prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Bruit de mesure $\Rightarrow \hat{\theta}_n$ aléatoire $\Rightarrow \hat{Y}$ aléatoire
- Objectif : quantifier l'incertitude sur \hat{Y}
- Comment : identifier d'abord la loi de $\hat{\theta}_n$

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- θ_0 estimé par

$$\hat{\theta}_n = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Utilisation classique : prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Bruit de mesure $\Rightarrow \hat{\theta}_n$ aléatoire $\Rightarrow \hat{Y}$ aléatoire
- Objectif : quantifier l'incertitude sur \hat{Y}
- **Comment : identifier d'abord la loi de $\hat{\theta}_n$**

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Si f suffisamment régulière, $\hat{\theta}_n$ asymptotiquement gaussien car M-estimateur.
- En pratique, recueillir des mesures expérimentales coûte cher : n est petit (autour de 50)
- Nous ne sommes pas dans un cadre asymptotique et $\hat{\theta}_n$ ne peut pas être approché par une loi gaussienne
- Solutions possibles :
 - Bootstrap
 - cadre bayésien et MCMC

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Si f suffisamment régulière, $\hat{\theta}_n$ asymptotiquement gaussien car M-estimateur.
- En pratique, recueillir des mesures expérimentales coûte cher : n est petit (autour de 50)
- **Nous ne sommes pas dans un cadre asymptotique et $\hat{\theta}_n$ ne peut pas être approché par une loi gaussienne**
- Solutions possibles :
 - Bootstrap
 - cadre bayésien et MCMC

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Si f suffisamment régulière, $\hat{\theta}_n$ asymptotiquement gaussien car M-estimateur.
- En pratique, recueillir des mesures expérimentales coûte cher : n est petit (autour de 50)
- **Nous ne sommes pas dans un cadre asymptotique et $\hat{\theta}_n$ ne peut pas être approché par une loi gaussienne**
- Solutions possibles :
 - Bootstrap
 - cadre bayésien et MCMC

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Si f suffisamment régulière, $\hat{\theta}_n$ asymptotiquement gaussien car M-estimateur.
- En pratique, recueillir des mesures expérimentales coûte cher : n est petit (autour de 50)
- **Nous ne sommes pas dans un cadre asymptotique et $\hat{\theta}_n$ ne peut pas être approché par une loi gaussienne**
- Solutions possibles :
 - Bootstrap
 - cadre bayésien et MCMC

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Si f suffisamment régulière, $\hat{\theta}_n$ asymptotiquement gaussien car M-estimateur.
- En pratique, recueillir des mesures expérimentales coûte cher : n est petit (autour de 50)
- **Nous ne sommes pas dans un cadre asymptotique et $\hat{\theta}_n$ ne peut pas être approché par une loi gaussienne**
- Solutions possibles :
 - Bootstrap
 - cadre bayésien et MCMC

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 **Analyse d'incertitudes**

- Le problème posé en cinétique chimique
- **Le bootstrap**
- Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse
- Markov Chain Monte Carlo
- Conclusions sur l'analyse d'incertitudes

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

Bootstrap : données du problème

- Objectif : approcher la distribution de $\hat{\theta}_n$
- Plus précisément : générer un échantillon de $\hat{\theta}_n$
- Ce dont on dispose :
 - (c_i, Y_i) pour $i = 1, \dots, n$ mesures expérimentales
 - Avec ces mesures on fait une première estimation :

$$\theta_{obs} = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- On calcule alors les résidus

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - f(c_i, \theta_{obs})$$

Bootstrap : données du problème

- Objectif : approcher la distribution de $\hat{\theta}_n$
- Plus précisément : générer un échantillon de $\hat{\theta}_n$

- Ce dont on dispose :

- (c_i, Y_i) pour $i = 1, \dots, n$ mesures expérimentales
- Avec ces mesures on fait une première estimation :

$$\theta_{obs} = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- On calcule alors les résidus

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - f(c_i, \theta_{obs})$$

Bootstrap : données du problème

- Objectif : approcher la distribution de $\hat{\theta}_n$
- Plus précisément : générer un échantillon de $\hat{\theta}_n$
- Ce dont on dispose :
 - (c_i, Y_i) pour $i = 1, \dots, n$ mesures expérimentales
 - Avec ces mesures on fait une première estimation :

$$\theta_{obs} = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- On calcule alors les résidus

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - f(c_i, \theta_{obs})$$

Bootstrap : données du problème

- Objectif : approcher la distribution de $\hat{\theta}_n$
- Plus précisément : générer un échantillon de $\hat{\theta}_n$
- Ce dont on dispose :
 - (c_i, Y_i) pour $i = 1, \dots, n$ mesures expérimentales
 - Avec ces mesures on fait une première estimation :

$$\theta_{obs} = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- On calcule alors les résidus

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - f(c_i, \theta_{obs})$$

Bootstrap : données du problème

- Objectif : approcher la distribution de $\hat{\theta}_n$
- Plus précisément : générer un échantillon de $\hat{\theta}_n$
- Ce dont on dispose :
 - (c_i, Y_i) pour $i = 1, \dots, n$ mesures expérimentales
 - Avec ces mesures on fait une première estimation :

$$\theta_{obs} = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- On calcule alors les résidus

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - f(c_i, \theta_{obs})$$

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.
- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.
- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.
- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.
- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Mais en pratique, on ne connaît pas la loi des erreurs ϵ .

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.
- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Mais en pratique, on ne connaît pas la loi des erreurs ϵ .

Idée : les résidus approchent les vraies erreurs, on estime la loi des vraies erreurs ϵ par la loi des résidus $\hat{\epsilon}$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.

Données simulées $Y^* = f(c, \theta_{obs}) + \hat{\epsilon}$

- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.
- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.

Données simulées $Y^* = f(c, \theta_{obs}) + \hat{\epsilon}$

- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.

Nouvelle estimation $\hat{\theta}_n^*$

- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Bootstrap : principe

- Si on connaissait la vraie loi des erreurs ϵ , on pourrait générer de nouveaux jeux de données expérimentales en utilisant le modèle $Y = f(c, \theta_0) + \epsilon$.

Données simulées $Y^* = f(c, \theta_{obs}) + \hat{\epsilon}$

- Pour chaque jeu de données on pourrait faire une minimisation moindres carrés et obtenir une nouvelle estimation $\hat{\theta}_n$.

Nouvelle estimation $\hat{\theta}_n^*$

- Toutes ces estimations forment alors un échantillon de la loi de $\hat{\theta}_n$.

Echantillon de la loi de $\hat{\theta}_n^*$

L'estimateur $\hat{\theta}_n^*$ est consistant (convergence vers la loi limite de l'estimateur $\hat{\theta}_n$)

- Pour obtenir **une** réalisation de $\hat{\theta}_n^*$ il faut résoudre un problème de minimisation moindres carrés non-linéaires
- Echantillon bootstrap de grande taille : temps de calcul très important si une évaluation du modèle f est coûteuse
- **Idée : surfaces de réponse**
i.e. faire passer une surface par des points d'échantillonnage

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

- Le problème posé en cinétique chimique
- Le bootstrap
- **Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse**
- Markov Chain Monte Carlo
- Conclusions sur l'analyse d'incertitudes

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\theta_{obs}, \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_n)$$

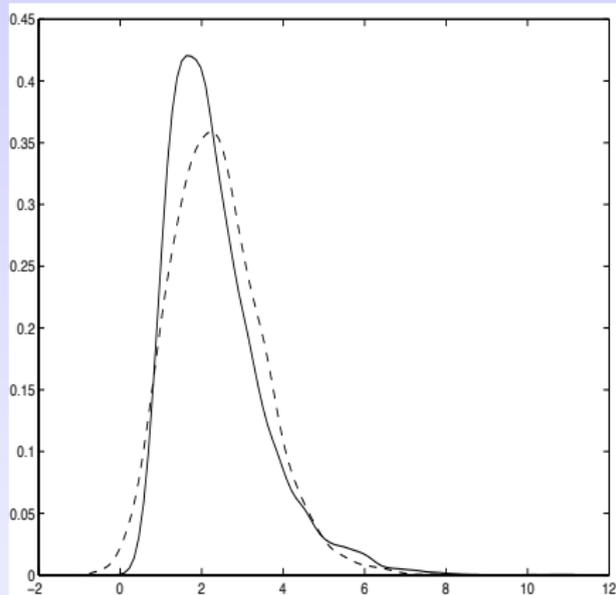
- Une réalisation bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est une fonction φ (non explicite) des n résidus $\hat{\epsilon}_i$
- Echantillon de taille B de la loi de $\hat{\theta}_n^*$:
 - Tirage de B jeux de n résidus $\hat{\epsilon}_i$
 - Evaluation de la fonction φ en chacun de ces B jeux.
- Idée : évaluer cette fonction φ en un nombre de points **restreint** $b \ll B$ et utiliser ces b points pour construire une approximation $\tilde{\varphi}$ de φ
- Conclusion : on évalue la fonction seulement b fois au lieu de B avec $b \ll B$.

$$\hat{\theta}_n^* = \varphi(\hat{\theta}_n, \epsilon_1^*, \dots, \epsilon_n^*)$$

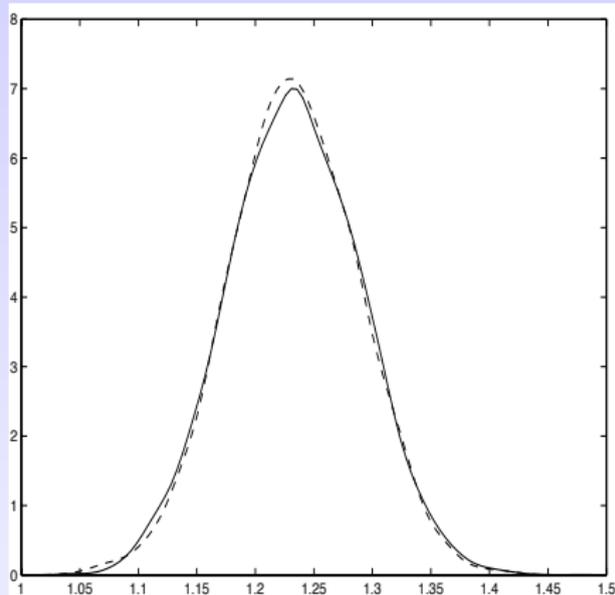
- $\tilde{\varphi}$: polynômes des n variables $\epsilon_1^*, \dots, \epsilon_n^*$ (*polynômes de chaos*)
- $\tilde{\varphi}$: Support Vector Regression

Exemples : modèle simplifié d'hydrodésulfuration

$n = 10$ mesures expérimentales, 2 paramètres inconnus notés k et α
 $b = 132$ évaluations de la fonction φ



Paramètre k

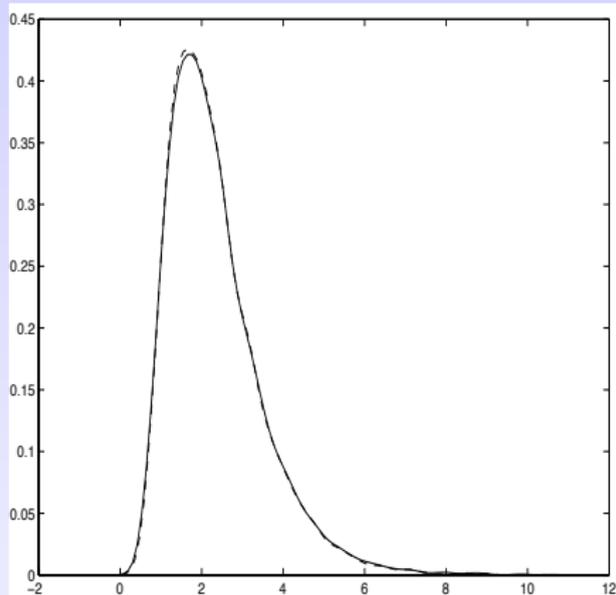


Paramètre α

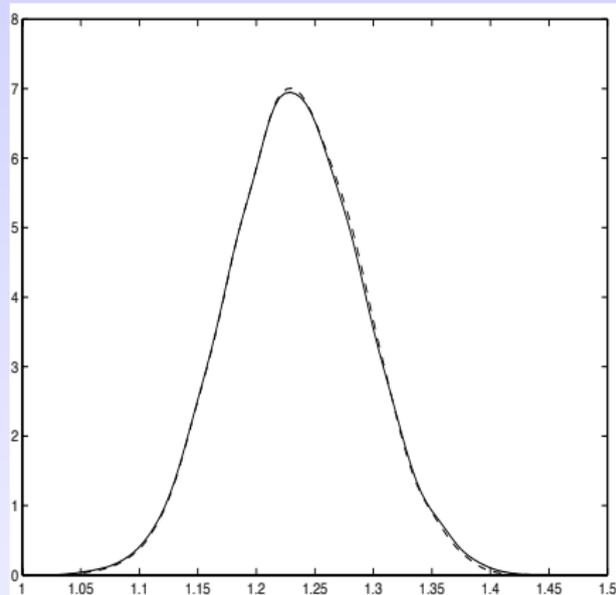
Trait plein : échantillon bootstrap ($B = 10000$)
Pointillé : approximation par un polynôme d'ordre 2

Exemples : modèle simplifié d'hydrodésulfuration

$n = 10$ mesures expérimentales, 2 paramètres inconnus notés k et α
 $b = 50$ évaluations de la fonction φ



Paramètre k



Paramètre α

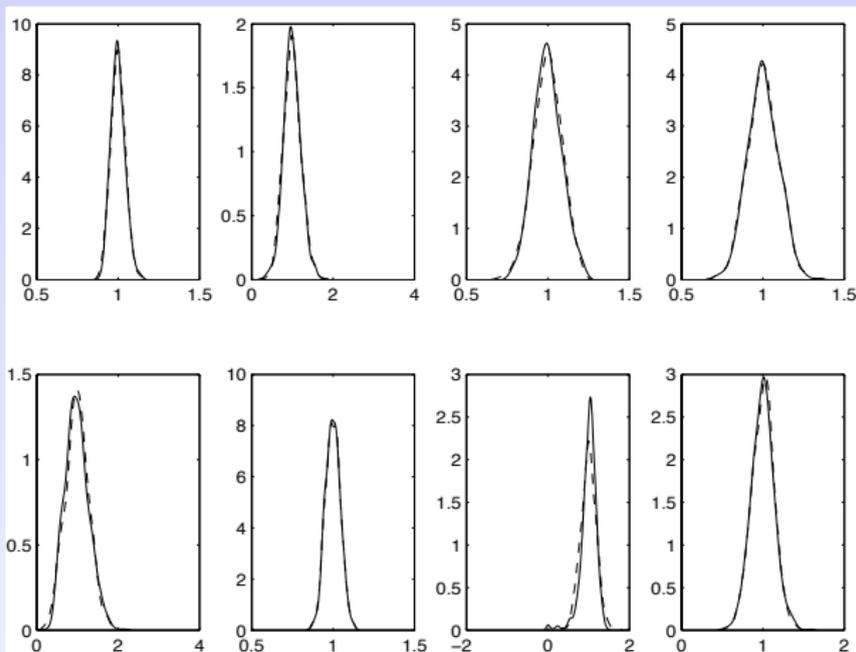
Trait plein : échantillon bootstrap ($B = 10000$)

Pointillé : approximation par SVR

Exemples : modèle d'isomérisation du n-butane

$n = 63$ expériences, 8 paramètres inconnus notés P_1, \dots, P_8

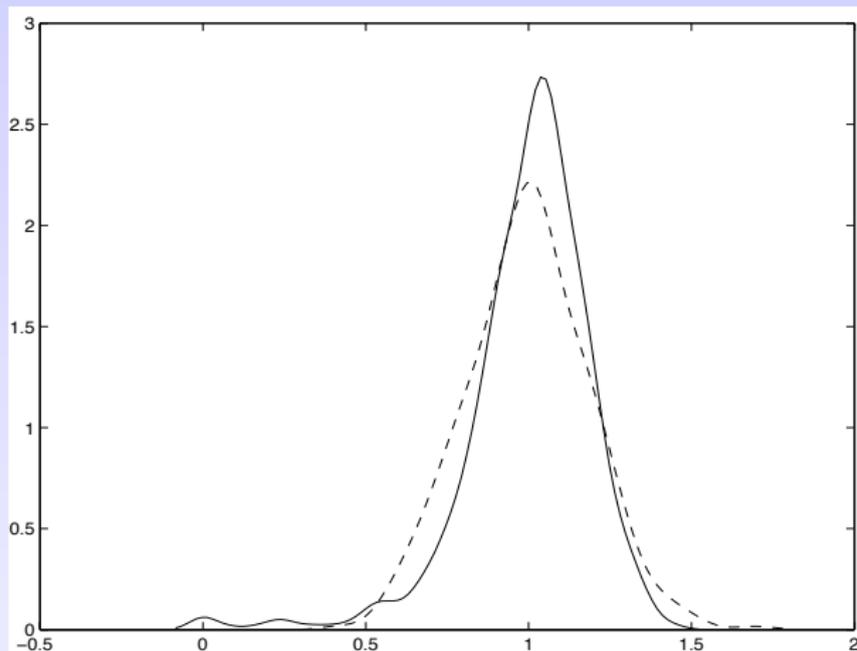
$b = 200$ évaluations de la fonction φ



Trait plein : échantillon bootstrap ($B = 10000$)

Pointillé : approximation par SVR

Zoom sur paramètre P_7



Trait plein : échantillon bootstrap ($B = 10000$)

Pointillé : approximation par SVR

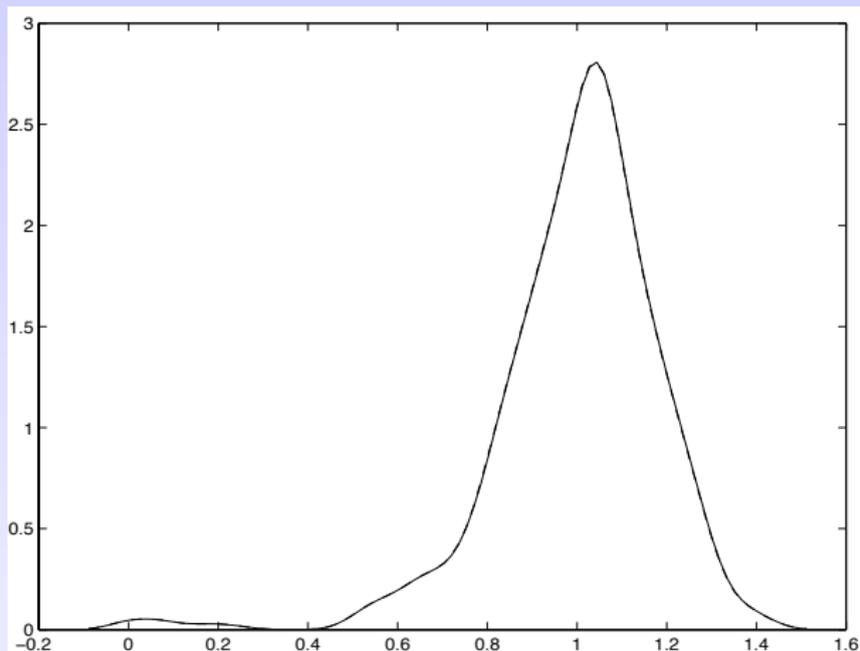
- Modèle HDS : très bonne approximation pour les deux méthodes
- Isomérisation du n-butane
 - Polynômes de chaos : n trop élevé, beaucoup de coefficients à estimer
 - SVM : bonne approximation, sauf sur un paramètre (queue de distribution)

- Modèle HDS : très bonne approximation pour les deux méthodes
- Isomérisation du n-butane
 - Polynômes de chaos : n trop élevé, beaucoup de coefficients à estimer
 - SVM : bonne approximation, sauf sur un paramètre (queue de distribution)

- Connaissance de la dérivée première de φ
Argmin + th. fonctions implicites : dérivée seconde du modèle f
- Polynômes de chaos : généralisation directe
- SVM : plus compliqué

Voir travaux en SVM pour sorties multiples

Zoom sur paramètre P_7



Trait plein : échantillon bootstrap ($B = 10000$)
Pointillé : approximation par SVM + dérivées ($b = 50$)

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 **Analyse d'incertitudes**

- Le problème posé en cinétique chimique
- Le bootstrap
- Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse
- **Markov Chain Monte Carlo**
- Conclusions sur l'analyse d'incertitudes

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

- Il est possible d'écrire la loi de $\hat{\theta}_n$ à l'aide du paradigme bayésien
- Cette loi est connue à une constante près (normalisation)
- Génération d'un échantillon selon cette loi par algorithme de Markov Chain Monte Carlo
 - On construit une chaîne de Markov de loi limite égale à la loi de $\hat{\theta}_n$
 - Asymptotiquement, on génère donc un échantillon selon la loi voulue

Limitation

Pas de diagnostic de convergence fiable si espace d'état non dénombrable

- Il est possible d'écrire la loi de $\hat{\theta}_n$ à l'aide du paradigme bayésien
- Cette loi est connue à une constante près (normalisation)
- Génération d'un échantillon selon cette loi par algorithme de Markov Chain Monte Carlo
 - On construit une chaîne de Markov de loi limite égale à la loi de $\hat{\theta}_n$
 - Asymptotiquement, on génère donc un échantillon selon la loi voulue

Limitation

Pas de diagnostic de convergence fiable si espace d'état non dénombrable

- Il est possible d'écrire la loi de $\hat{\theta}_n$ à l'aide du paradigme bayésien
- Cette loi est connue à une constante près (normalisation)
- Génération d'un échantillon selon cette loi par algorithme de Markov Chain Monte Carlo
 - On construit une chaîne de Markov de loi limite égale à la loi de $\hat{\theta}_n$
 - **Asymptotiquement**, on génère donc un échantillon selon la loi voulue

Limitation

Pas de diagnostic de convergence fiable si espace d'état non dénombrable

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 **Analyse d'incertitudes**

- Le problème posé en cinétique chimique
- Le bootstrap
- Approximation d'une distribution bootstrap par surfaces de réponse
- Markov Chain Monte Carlo
- **Conclusions sur l'analyse d'incertitudes**

3 Analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

Conclusions incertitudes

Rappel : on cherche à identifier la loi de l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Bootstrap : problème de temps de calcul
- Surfaces de réponse
 - Méthode attirante vis-à-vis du coût numérique
 - Problème en grande dimension (surtout polynômes de chaos)
- Surfaces de réponse et dérivées
 - Amélioration significative
 - Limitation : calcul des dérivées (adjoint, dérivation automatique de code)

Conclusions incertitudes

Rappel : on cherche à identifier la loi de l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Bootstrap : problème de temps de calcul
- Surfaces de réponse
 - Méthode attirante vis-à-vis du coût numérique
 - Problème en grande dimension (surtout polynômes de chaos)
- Surfaces de réponse et dérivées
 - Amélioration significative
 - Limitation : calcul des dérivées (adjoint, dérivation automatique de code)

Conclusions incertitudes

Rappel : on cherche à identifier la loi de l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Bootstrap : problème de temps de calcul
- Surfaces de réponse
 - Méthode attirante vis-à-vis du coût numérique
 - Problème en grande dimension
(surtout polynômes de chaos)
- Surfaces de réponse et dérivées
 - Amélioration significative
 - Limitation : calcul des dérivées
(adjoint, dérivation automatique de code)

Conclusions incertitudes

Rappel : on cherche à identifier la loi de l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2$$

- Bootstrap : problème de temps de calcul
- Surfaces de réponse
 - Méthode attirante vis-à-vis du coût numérique
 - Problème en grande dimension
(surtout polynômes de chaos)
- Surfaces de réponse et dérivées
 - Amélioration significative
 - Limitation : calcul des dérivées
(adjoint, dérivation automatique de code)

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

3 **Analyse de sensibilité**

- Rappel du problème
- Estimation par polynômes locaux
- Estimation efficace
- Comparaisons
- Conclusion sur l'analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

3 **Analyse de sensibilité**

- **Rappel du problème**
- Estimation par polynômes locaux
- Estimation efficace
- Comparaisons
- Conclusion sur l'analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- Paramètres inconnus θ_0 estimés par

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Puis prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Question : parmi les paramètres estimés, quels sont ceux qui influencent le plus la sortie \hat{Y} ?

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- Paramètres inconnus θ_0 estimés par

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Puis prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Question : parmi les paramètres estimés, quels sont ceux qui influencent le plus la sortie \hat{Y} ?

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- Paramètres inconnus θ_0 estimés par

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Puis prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Question : parmi les paramètres estimés, quels sont ceux qui influencent le plus la sortie \hat{Y} ?

- Mesures expérimentales : $(c_i, Y_i), i = 1, \dots, n$
- Paramètres inconnus θ_0 estimés par

$$\hat{\theta}_n = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \omega_i (Y_i - f(c_i, \theta))^2 \quad \omega_i \text{ pondération}$$

- Puis prédiction

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

- Question : parmi les paramètres estimés, quels sont ceux qui influencent le plus la sortie \hat{Y} ?

- En cinétique chimique,

$$\hat{Y} = f(c_0, \hat{\theta}_n)$$

avec $\hat{\theta}_n$ vecteur aléatoire (paramètres estimés).

- Formalisme classique

$$Y = f(X^1, \dots, X^d)$$

avec X^1, \dots, X^d facteurs aléatoires.

Pour quantifier l'influence d'un facteur, on définit :

Indices de sensibilité

$$S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^i))}{\text{Var}(Y)} \quad (\text{1er ordre})$$

- Interprétation :
 - $\mathbb{E}(Y|X^i)$: fonction de X^i uniquement qui approche le mieux Y (au sens écart quadratique)
 - $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^i))$: variations de la sortie si elle était fonction uniquement de X^i
 - puis normalisation par la variation totale $\text{Var}(Y)$

Pour quantifier l'influence d'un facteur, on définit :

Indices de sensibilité

$$S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^i))}{\text{Var}(Y)} \quad (\text{1er ordre})$$

- Interprétation :
 - $\mathbb{E}(Y|X^i)$: fonction de X^i **uniquement** qui approche le mieux Y (au sens écart quadratique)
 - $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^i))$: variations de la sortie si elle était fonction uniquement de X^i
 - puis normalisation par la variation totale $\text{Var}(Y)$

- Techniques usuelles :
 - Sobol
 - FAST

Limitations

Nombre d'évaluations
Hypothèse d'indépendance des entrées

- Exemples de cas problématiques
 - Réservoir pétrolier (temps de calcul)
 - Cinétique chimique (pas d'indépendance)

- Techniques usuelles :
 - Sobol
 - FAST

Limitations

Nombre d'évaluations
Hypothèse d'indépendance des entrées

- Exemples de cas problématiques
 - Réservoir pétrolier (temps de calcul)
 - Cinétique chimique (pas d'indépendance)

- Techniques usuelles :
 - Sobol
 - FAST

Limitations

Nombre d'évaluations
Hypothèse d'indépendance des entrées

- Exemples de cas problématiques
 - Réservoir pétrolier (temps de calcul)
 - Cinétique chimique (pas d'indépendance)

Sans hypothèse d'indépendance

- Méthode de McKay :
 - Echantillonnage selon lois conditionnelles
 - Hypercubes latins répliqués

Nombre d'évaluations très important

- Méthode de Oakley et O'Hagan :
 - $f(\mathbf{X})$ approchée par processus Gaussiens
 - Puis intégration / loi de \mathbf{X}

Evaluation numérique d'intégrales multiples (dimension $2d - 1$)

Sans hypothèse d'indépendance

- Méthode de McKay :
 - Echantillonnage selon lois conditionnelles
 - Hypercubes latins répliqués

Nombre d'évaluations très important

- Méthode de Oakley et O'Hagan :
 - $f(\mathbf{X})$ approchée par processus Gaussiens
 - Puis intégration / loi de \mathbf{X}

Evaluation numérique d'intégrales multiples (dimension $2d - 1$)

Sans hypothèse d'indépendance

- Méthode de McKay :
 - Echantillonnage selon lois conditionnelles
 - Hypercubes latins répliqués

Nombre d'évaluations très important

- Méthode de Oakley et O'Hagan :
 - $f(\mathbf{X})$ approchée par processus Gaussiens
 - Puis intégration / loi de \mathbf{X}

Evaluation numérique d'intégrales multiples (dimension $2d - 1$)

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

3 **Analyse de sensibilité**

- Rappel du problème
- **Estimation par polynômes locaux**
- Estimation efficace
- Comparaisons
- Conclusion sur l'analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

- On écrit un modèle de régression classique de Y sur X

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

- Estimation de la fonction $m(\cdot)$: régression non-paramétrique (pas d'hypothèse d'appartenance à une famille de fonctions)
ex : splines, polynômes locaux, ...

- On écrit un modèle de régression classique de Y sur X

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

où $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$.

- Estimation de la fonction $m(\cdot)$: régression non-paramétrique (pas d'hypothèse d'appartenance à une famille de fonctions)
ex : splines, polynômes locaux, ...

- On écrit un modèle de régression classique de Y sur X

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

où $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$.

$(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)$ erreurs centrées, réduites, indépendantes des X_i .

- Estimation de la fonction $m(\cdot)$: régression non-paramétrique (pas d'hypothèse d'appartenance à une famille de fonctions)
ex : splines, polynômes locaux, ...

- On écrit un modèle de régression classique de Y sur X

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

où $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$.

$(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)$ erreurs centrées, réduites, indépendantes des X_i .

- Estimation de la fonction $m(\cdot)$: régression non-paramétrique (pas d'hypothèse d'appartenance à une famille de fonctions)
ex : splines, polynômes locaux, ...

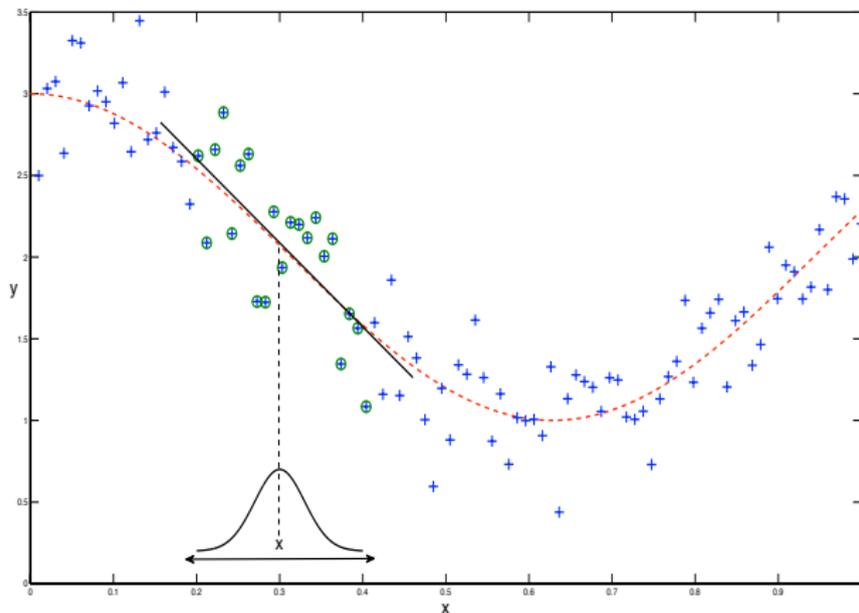
- On écrit un modèle de régression classique de Y sur X

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

où $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$.

$(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)$ erreurs centrées, réduites, indépendantes des X_i .

- Estimation de la fonction $m(\cdot)$: régression non-paramétrique (pas d'hypothèse d'appartenance à une famille de fonctions)
ex : splines, **polynômes locaux**, ...



pointillé : vraie fonction $m(\cdot)$

$m(\cdot)$ approchée *localement* par un polynôme d'ordre p

$$m(z) \approx \beta_0 + \beta_1(z - x) + \dots + \beta_p(z - x)^p$$

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de **moindres carrés pondérés**

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS, ...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de **moindres carrés pondérés**

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS, ...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de **moindres carrés pondérés**

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS, ...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS,
...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS,
...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS, ...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS, ...

Polynômes locaux (3/5)

- Finalement, le polynôme est ajusté à partir de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ par résolution d'un problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K \left(\frac{X_i - x}{h} \right)$$

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$$

- Trois paramètres à sélectionner :
 - Le noyau K : peu d'influence
 - L'ordre p du polynôme : en pratique 1 ou 2
 - Le paramètre d'échelle h : asymptotique, validation croisée, EBBS,
 - ...

- Estimateur $\hat{m}(x)$ de la fonction $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ obtenu avec un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$
- On veut estimer $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$: idée de plug-in avec un autre échantillon indépendant $(\tilde{X}_j)_{j=1, \dots, n'}$

$$\frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} \left(\hat{m}(\tilde{X}_j) - \hat{\hat{m}} \right)^2$$

- En pratique
 - Data splitting (n grand)
 - Génération d'un nouvel échantillon de la loi jointe des entrées (coût calculatoire possible)
 - Techniques de ré-échantillonnage : bootstrap, validation croisée

- Estimateur $\hat{m}(x)$ de la fonction $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ obtenu avec un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$
- On veut estimer $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$: idée de plug-in avec un autre échantillon indépendant $(\tilde{X}_j)_{j=1, \dots, n'}$

$$\frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} \left(\hat{m}(\tilde{X}_j) - \hat{m} \right)^2$$

- En pratique
 - Data splitting (n grand)
 - Génération d'un nouvel échantillon de la loi jointe des entrées (coût calculatoire possible)
 - Techniques de ré-échantillonnage : bootstrap, validation croisée

- Estimateur $\hat{m}(x)$ de la fonction $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ obtenu avec un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$
- On veut estimer $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$: idée de plug-in avec un autre échantillon indépendant $(\tilde{X}_j)_{j=1, \dots, n'}$

$$\frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} \left(\hat{m}(\tilde{X}_j) - \hat{\hat{m}} \right)^2$$

- En pratique
 - Data splitting (n grand)
 - Génération d'un nouvel échantillon de la loi jointe des entrées (coût calculatoire possible)
 - Techniques de ré-échantillonnage : bootstrap, validation croisée

- On peut montrer que l'estimateur proposé est asymptotiquement sans biais
- Relation classique $\text{Var}(Y) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$
 - On peut se ramener au calcul de $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$
 - $\text{Var}(Y|X)$ estimé par polynômes locaux
 - Puis $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$ par plug-in
 - Dans ce cas on obtient un estimateur consistant (asymptotiquement sans biais et variance tendant vers 0)
- Amélioration possible d'un point de vue théorique : vitesse de convergence non-paramétrique

Peut-on atteindre la vitesse de convergence optimale ?

- On peut montrer que l'estimateur proposé est asymptotiquement sans biais
- Relation classique $\text{Var}(Y) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$
 - On peut se ramener au calcul de $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$
 - $\text{Var}(Y|X)$ estimé par polynômes locaux
 - Puis $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$ par plug-in
 - Dans ce cas on obtient un estimateur consistant (asymptotiquement sans biais et variance tendant vers 0)
- Amélioration possible d'un point de vue théorique : vitesse de convergence non-paramétrique

Peut-on atteindre la vitesse de convergence optimale ?

- On peut montrer que l'estimateur proposé est asymptotiquement sans biais
- Relation classique $\text{Var}(Y) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$
 - On peut se ramener au calcul de $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$
 - $\text{Var}(Y|X)$ estimé par polynômes locaux
 - Puis $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$ par plug-in
 - Dans ce cas on obtient un estimateur consistant (asymptotiquement sans biais et variance tendant vers 0)
- Amélioration possible d'un point de vue théorique : vitesse de convergence non-paramétrique

Peut-on atteindre la vitesse de convergence optimale ?

- On peut montrer que l'estimateur proposé est asymptotiquement sans biais
- Relation classique $\text{Var}(Y) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$
 - On peut se ramener au calcul de $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$
 - $\text{Var}(Y|X)$ estimé par polynômes locaux
 - Puis $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$ par plug-in
 - Dans ce cas on obtient un estimateur consistant (asymptotiquement sans biais et variance tendant vers 0)
- Amélioration possible d'un point de vue théorique : vitesse de convergence non-paramétrique

Peut-on atteindre la vitesse de convergence optimale ?

- On peut montrer que l'estimateur proposé est asymptotiquement sans biais
- Relation classique $\text{Var}(Y) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$
 - On peut se ramener au calcul de $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$
 - $\text{Var}(Y|X)$ estimé par polynômes locaux
 - Puis $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$ par plug-in
 - Dans ce cas on obtient un estimateur consistant (asymptotiquement sans biais et variance tendant vers 0)
- Amélioration possible d'un point de vue théorique : vitesse de convergence non-paramétrique

Peut-on atteindre la vitesse de convergence optimale ?

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

3 **Analyse de sensibilité**

- Rappel du problème
- Estimation par polynômes locaux
- **Estimation efficace**
- Comparaisons
- Conclusion sur l'analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

Réécriture du problème

$(X_i, Y_i), i = 1, \dots, n$ échantillon de (X, Y) , densité $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$.

On veut estimer

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

On définit $T : \mathbb{L}^2(dx dy) \rightarrow \mathbb{R}$ tel que

$$T(f) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) = \iint \left(\frac{\int y f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy} \right)^2 f(x, y) dx dy.$$

pour $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$.

B. Laurent (1996) a étudié l'estimation efficace de fonctionnelles de la forme

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

où ϕ régulière.

Idée principale

Développer $u \rightarrow \phi(u, x) \in C^3(\Omega)$ autour d'un estimateur \hat{f} préliminaire

B. Laurent (1996) a étudié l'estimation efficace de fonctionnelles de la forme

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

où ϕ régulière.

Idée principale

Développer $u \rightarrow \phi(u, x) \in C^3(\Omega)$ autour d'un estimateur \hat{f} préliminaire

B. Laurent (1996) a étudié l'estimation efficace de fonctionnelles de la forme

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

où ϕ régulière.

Idée principale

Développer $u \rightarrow \phi(u, x) \in C^3(\Omega)$ autour d'un estimateur \hat{f} préliminaire

$$\begin{aligned} \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) &= \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) + \frac{\partial \phi}{\partial u}(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) \left(f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}) \right) \\ &+ \frac{\partial^2 \phi}{\partial u^2}(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) \left(f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}) \right)^2 + \gamma. \end{aligned}$$

B. Laurent (1996) a étudié l'estimation efficace de fonctionnelles de la forme

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

où ϕ régulière.

Idée principale

Développer $u \rightarrow \phi(u, x) \in C^3(\Omega)$ autour d'un estimateur \hat{f} préliminaire

$$\begin{aligned} \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) &= \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) + \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) \\ &\quad + \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 + \gamma. \end{aligned}$$

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

$$\begin{aligned} T(f) &= \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} + \Gamma_n \end{aligned}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

$$\begin{aligned} T(f) &= \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} + \Gamma_n \\ &= \int G(\hat{f}, \cdot) + \int H(\hat{f}, \cdot) f + \int K(\hat{f}, \cdot) f^2 + \Gamma_n \end{aligned}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

$$\begin{aligned} T(f) &= \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} + \Gamma_n \\ &= \int G(\hat{f}, \cdot) + \int H(\hat{f}, \cdot) f + \int K(\hat{f}, \cdot) f^2 + \Gamma_n \end{aligned}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

$$\begin{aligned} T(f) &= \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} + \Gamma_n \\ &= \int G(\hat{f}, \cdot) + \int H(\hat{f}, \cdot) f + \int K(\hat{f}, \cdot) f^2 + \Gamma_n \end{aligned}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

$$\begin{aligned} T(f) &= \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int \phi(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \phi'_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int \phi''_1(\hat{f}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) (f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} + \Gamma_n \\ &= \int G(\hat{f}, \cdot) + \int H(\hat{f}, \cdot) f + \int K(\hat{f}, \cdot) f^2 + \Gamma_n \end{aligned}$$

- Γ_n négligeable
- $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ fonctionnelle linéaire de f : pas de problème
- $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ fonctionnelle quadratique de f : travail technique

B. Laurent :

$$T(f) = \int \phi(f(\mathbf{x}), \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

On veut estimer

$$T(f) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) = \iint \left(\frac{\int y f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy} \right)^2 f(x, y) dx dy.$$

Comme B. Laurent, on développe $T(f)$ autour d'un estimateur préliminaire \hat{f} .

Développement de $T(f)$

Après manipulation, on obtient

$$T(f) = \iint_{\Gamma_n} H(\hat{f}, x, y) f(x, y) dx dy + \iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x, y) f(x, z) dx dy dz$$

où

$$\begin{aligned} H(\hat{f}, x, y) &= 2y \hat{m}(x) - \hat{m}(x)^2 \\ K(\hat{f}, x, y, z) &= \frac{1}{\int \hat{f}(x, y) dy} [y z + \hat{m}(x)^2 - (y + z) \hat{m}(x)] \\ \hat{m}(x) &= \frac{\int y \hat{f}(x, y) dy}{\int \hat{f}(x, y) dy}. \end{aligned}$$

On veut estimer

$$\iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x, y) f(x, z) = \iiint \psi(x, y, z) f(x, y) f(x, z)$$

- Idée : même procédure que B. Laurent
- On se donne une base $(p_i)_{i \in D}$ de $\mathbb{L}^2(dx dy)$.

Estimateur proposé :

$$\begin{aligned}\hat{\theta}_n &= \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) \psi(X_k, u, Y_k) du \\ &\quad - \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \\ &\quad \iiint p_i(x, y) p_{i'}(x, z) \psi(x, y, z) dx dy dz.\end{aligned}$$

Hypothèses

X_1, \dots, X_n i.i.d. $f \in \mathbb{L}^2(dx)$. $(p_i)_{i \in D}$ base orthonormée de $\mathbb{L}^2(dx)$

- $\psi(x, y, z)$ bornée, f uniformément bornée et $f \in \mathcal{E}$,

$$\mathcal{E} = \left\{ \sum_{i \in D} a_i p_i; \sum_{i \in D} \left| \frac{a_i^2}{c_i^2} \right| \leq 1 \right\}$$

- $M_n \subset D$ tq $\left(\sup_{i \notin M_n} |c_i|^2 \right)^2 \approx \frac{|M_n|}{n^2}$
- $\forall t \in \mathbb{L}^2(d\mu), \int (S_{M_n} t - t)^2 d\mu \rightarrow 0$

Théorème (Estimation efficace de $\theta = \int \psi(x, y, z)f(x, y)f(x, z)$)

(i) Si $|M_n|/n \rightarrow 0$

$$\sqrt{n} (\hat{\theta}_n - \theta) \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi)),$$

$$\left| n\mathbb{E} (\hat{\theta}_n - \theta)^2 - \Lambda(f, \psi) \right| \leq \gamma_1 \left[\frac{|M_n|}{n} + \|S_{M_n}f - f\|_2 + \|S_{M_n}g - g\|_2 \right]$$

où $\Lambda(f, \psi) = 4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right]$

et

$$g(x, y) = \int f(x, u) \psi(x, y, u) du$$

Remarque : pour B. Laurent, $g = f\psi$.

Théorème (Estimation efficace de $\theta = \int \psi(x, y, z)f(x, y)f(x, z)$)

(i) Si $|M_n|/n \rightarrow 0$

$$\sqrt{n} (\hat{\theta}_n - \theta) \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi)),$$

$$\left| n\mathbb{E} (\hat{\theta}_n - \theta)^2 - \Lambda(f, \psi) \right| \leq \gamma_1 \left[\frac{|M_n|}{n} + \|S_{M_n}f - f\|_2 + \|S_{M_n}g - g\|_2 \right]$$

où $\Lambda(f, \psi) = 4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right]$

et

$$g(x, y) = \int f(x, u) \psi(x, y, u) du$$

Remarque : pour B. Laurent, $g = f\psi$.

$$T(f) = \iint H(\hat{f}, x, y) f(x, y) dx dy + \iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x, y) f(x, z) dx dy dz + \Gamma_n$$

Estimateur proposé :

$$\hat{T}_n = \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j) + \hat{\theta}_n$$

Théorème (Estimation efficace de $T(f)$)

(i) Si $|M_n|/n \rightarrow 0$

$$\sqrt{n} \left(\widehat{T}_n - T(f) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, C(f))$$

(ii)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\widehat{T}_n - T(f) \right)^2 = C(f)$$

où

$$C(f) = 4 \mathbb{E} \left(\text{Var}(Y|X) \mathbb{E}(Y|X)^2 \right) + \text{Var} \left(\mathbb{E}(Y|X)^2 \right)$$

Théorème

$C(f)$ constante optimale
Borne de Cramér-Rao semi-paramétrique

Théorème (Estimation efficace de $T(f)$)

(i) Si $|M_n|/n \rightarrow 0$

$$\sqrt{n} \left(\widehat{T}_n - T(f) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, C(f))$$

(ii)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\widehat{T}_n - T(f) \right)^2 = C(f)$$

où

$$C(f) = 4 \mathbb{E} \left(\text{Var}(Y|X) \mathbb{E}(Y|X)^2 \right) + \text{Var} \left(\mathbb{E}(Y|X)^2 \right)$$

Théorème

$C(f)$ constante optimale
Borne de Cramér-Rao semi-paramétrique

- On peut généraliser très facilement ce résultat aux estimateurs des fonctionnelles

$$\mathbb{E}\left(\psi\left(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)\right)\right)$$

si $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$, $\phi \in C^0(\Omega)$ et $\psi \in C^3(\Omega)$.

- Constante optimale :

$$C(f) = \mathbb{E}\left(\text{Var}(\phi(Y)|X) \left[\dot{\psi}\left(\mathbb{E}(Y|X)\right)\right]^2\right) + \text{Var}\left(\psi\left(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)\right)\right)$$

Meilleure procédure d'estimation

- Pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^i)^2)$, on utilise un échantillon du couple (X^i, Y)
- On ne tient pas compte des réalisations des autres facteurs X^j , $j \neq i$

Perd-on de l'information ?

Asymptotiquement, les autres composantes n'apportent pas d'information pour estimer S_i

Meilleure procédure d'estimation

- Pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^i)^2)$, on utilise un échantillon du couple (X^i, Y)
- On ne tient pas compte des réalisations des autres facteurs X^j , $j \neq i$

Perd-on de l'information ?

Asymptotiquement, les autres composantes n'apportent pas d'information pour estimer S_i

Meilleure procédure d'estimation

- Pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^i)^2)$, on utilise un échantillon du couple (X^i, Y)
- On ne tient pas compte des réalisations des autres facteurs X^j , $j \neq i$

Perd-on de l'information ?

Réponse :

- La constante optimale en considérant toutes les composantes (X^1, \dots, X^d) est encore $C(f)$
- Or notre estimateur \hat{T}_n atteint cette vitesse en travaillant uniquement avec (X^i, Y)

Asymptotiquement, les autres composantes n'apportent pas d'information pour estimer S_i

Meilleure procédure d'estimation

- Pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^i)^2)$, on utilise un échantillon du couple (X^i, Y)
- On ne tient pas compte des réalisations des autres facteurs X^j , $j \neq i$

Perd-on de l'information ?

Réponse :

- La constante optimale en considérant toutes les composantes (X^1, \dots, X^d) est encore $C(f)$
- Or notre estimateur \hat{T}_n atteint cette vitesse en travaillant uniquement avec (X^i, Y)

Asymptotiquement, les autres composantes n'apportent pas d'information pour estimer S_i

Meilleure procédure d'estimation

- Pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^i)^2)$, on utilise un échantillon du couple (X^i, Y)
- On ne tient pas compte des réalisations des autres facteurs X^j , $j \neq i$

Perd-on de l'information ?

Réponse :

- La constante optimale en considérant toutes les composantes (X^1, \dots, X^d) est encore $C(f)$
- Or notre estimateur \hat{T}_n atteint cette vitesse en travaillant uniquement avec (X^i, Y)

Asymptotiquement, les autres composantes n'apportent pas d'information pour estimer S_i

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

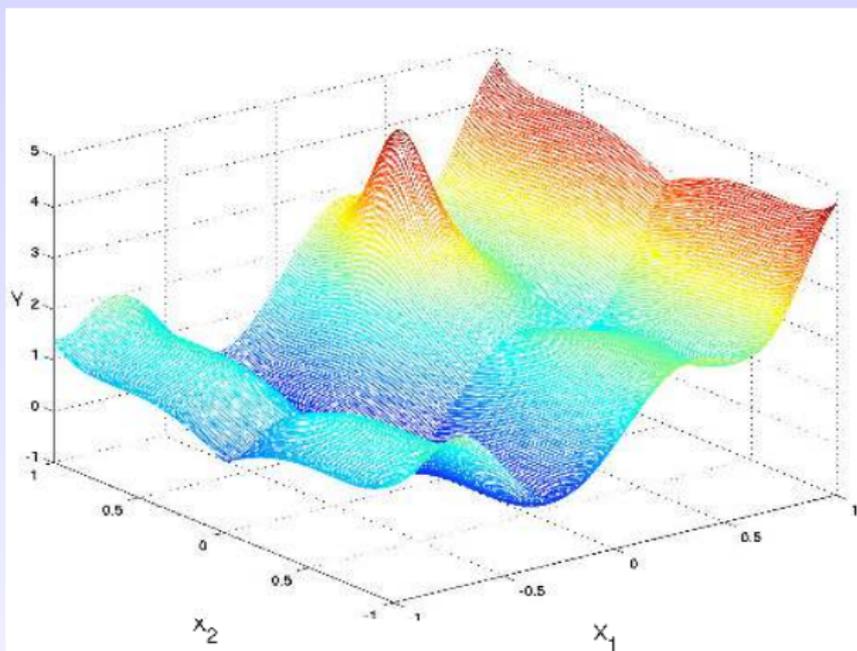
3 **Analyse de sensibilité**

- Rappel du problème
- Estimation par polynômes locaux
- Estimation efficace
- **Comparaisons**
- Conclusion sur l'analyse de sensibilité

4 Conclusions et perspectives

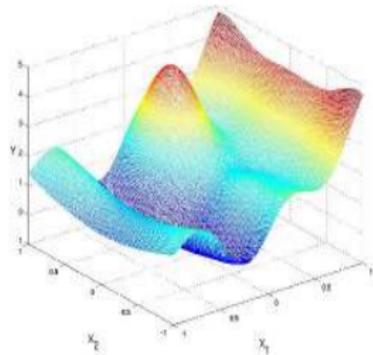
Exemple analytique (1/3)

$$Y = 0.2 \exp(X_1 - 3) + 2.2|X_2| + 1.3X_2^6 - 2X_2^2 - 0.5X_2^4 - 0.5X_1^4 + 2.5X_1^2 + 0.7X_1^3 + \frac{3}{(8X_1 - 2)^2 + (5X_2 - 3)^2 + 1} + \sin(5X_1) \cos(3X_1^2)$$

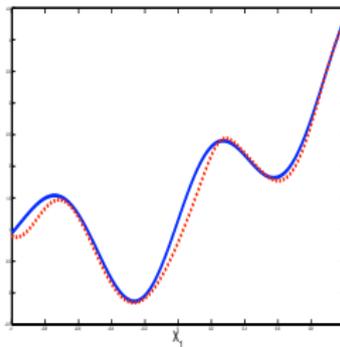


Krigeage (courbe théorique, approximation)

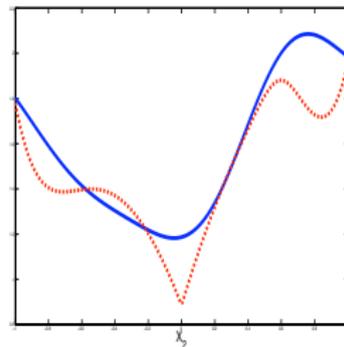
$$f(X_1, X_2)$$



$$\mathbb{E}(Y|X_1)$$



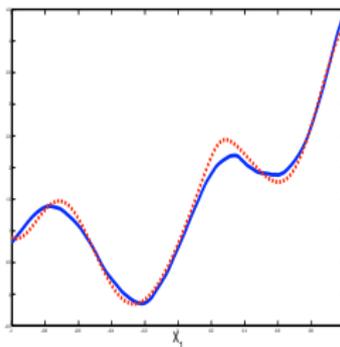
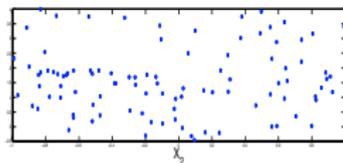
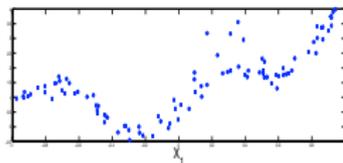
$$\mathbb{E}(Y|X_2)$$



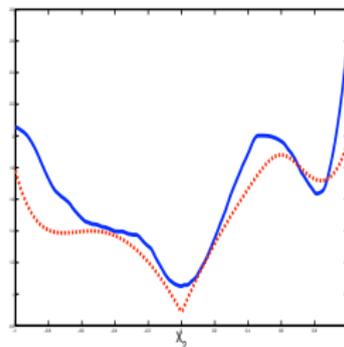
Polynômes locaux (courbe théorique, approximation)

Échantillons marginaux

$$\mathbb{E}(Y|X_1)$$



$$\mathbb{E}(Y|X_2)$$



Exemple analytique (3/3)

		Krigeage	Poly. loc.	Est. eff.
		100 pts	100 pts	100 pts
$\text{Var}(\mathbb{E}(Y X_1))$	1.0932	1.0539	1.0643	1.1701
$\text{Var}(\mathbb{E}(Y X_2))$	0.0729	0.1121	0.0527	0.0939

X_1 : résultats comparables

X_2 : meilleure précision pour les approximations marginales

1 Modélisation d'un système physique et incertitudes

2 Analyse d'incertitudes

3 **Analyse de sensibilité**

- Rappel du problème
- Estimation par polynômes locaux
- Estimation efficace
- Comparaisons
- **Conclusion sur l'analyse de sensibilité**

4 Conclusions et perspectives

- Polynômes locaux
 - Concept facile à appréhender
 - Résultats théoriques de convergence
 - Inconvénient : vitesse de convergence non-paramétrique

- Estimation efficace
 - **Vitesse de convergence optimale**
 - Bon comportement à n fini sur simulations
 - Estimation adaptative ?

- 1 Modélisation d'un système physique et incertitudes
- 2 Analyse d'incertitudes
- 3 Analyse de sensibilité
- 4 Conclusions et perspectives**

Analyse d'incertitudes

- Comment générer un échantillon de la loi d'un estimateur du maximum de vraisemblance ?
- Bootstrap intéressant, mais temps de calcul trop important
- **Solutions basées sur les surfaces de réponse très performantes (gain en nombre de minimisations moindres-carrés de l'ordre de 100)**

Analyse de sensibilité

- Comment estimer les indices de sensibilité quand les facteurs sont corrélés ?
- **Polynômes locaux**
- **Estimateur efficace, aucun autre estimateur ne converge plus vite vers les indices de sensibilité**

Analyse d'incertitudes

- Bornes de l'erreur d'approximation des surfaces de réponse pour le bootstrap
- Dérivées SVM
- Problèmes de grande dimension

Analyse de sensibilité

- Estimation adaptative des indices de sensibilité
- Etude théorique des indices dans le cas non-indépendant (Décomposition de Hoeffding)

Merci de votre attention !