

Modèles additifs de krigeage

Construction et estimation des paramètres de covariance

N. Durrande

Présentation : Je suis actuellement en 2^{ème} année de thèse dans le laboratoire CROCUS de l'Ecole des Mines de St-Etienne. Ma thèse porte sur la construction de modèles de krigeage adaptés aux problèmes de grande dimension. Elle est dirigée par L. Carraro et R. Le Riche et encadrée par O. Roustant et D. Ginsbourger.

Introduction

La construction de metamodèles en grande dimension peut s'avérer problématique puisque le nombre de points nécessaires pour remplir un volume augmente de manière exponentielle avec la dimension. Afin de contourner ce problème, une possibilité est de construire des modèles simplifiés. Dans le cadre de notre travail, nous nous intéressons plus particulièrement au cas des modèles additifs. Ces modèles consistent à approcher une fonction f de $x = (x_1 \dots x_d) \in \mathbb{R}^d$ par une somme de fonctions univariées définies sur les x_i

$$f(x) \approx \hat{f}(x) = \mu + \sum_{i=1}^d y_i(x_i). \quad (1)$$

Ces modèles sont très étudiés dans la littérature ([Sto85], [HT90], [New94]). Cependant, à l'exception des travaux de T. Plate [Pla99], les méthodes développées concernent le cas de modèles déterministes et non celui de modèles probabilistes comme le krigeage. Le travail qui est présenté ici s'intéresse au cas des modèles additifs de krigeage, en portant une attention toute particulière à la procédure d'estimation des paramètres.

Modèles additifs de krigeage

Nous appelons processus additif tout processus gaussien dont il existe une modification à trajectoires additives. Nous montrons que tout processus ayant un noyau de la forme

$$K(x, y) = \sum_{i=1}^d K_i(x_i, y_i) \quad (2)$$

où les K_i sont des noyaux symétriques semi-définis positifs est un processus additif. Par la suite nous utilisons des noyaux de ce type pour la construction de modèles de krigeage.

Les modèles de krigeage obtenus possèdent deux caractéristiques intéressantes :

- La moyenne de krigeage est une fonction additive
- La variance de prédiction rend compte de l'additivité du processus conditionné : elle peut donc s'annuler en des points ne correspondant pas à des points du plan d'expérience.

En revanche, l'utilisation de tels noyaux peut aboutir à la non-inversibilité des matrices de covariances pour certains plans d'expérience. Cependant, ces problèmes de non-inversibilité peuvent être évités si un critère simple sur le plan d'expérience est respecté.

Estimation des paramètres des noyaux additifs

Comme le montre l'équation 2, les noyaux additifs possèdent plus de paramètres à estimer que leurs homologues usuels puisque un noyau additif possède un paramètre de variance par direction alors que l'on a pour les noyaux classiques un unique paramètre de variance quelle que soit la dimension. Afin d'estimer de manière efficace l'ensemble de ces paramètres, nous proposons une procédure d'estimation séquentielle baptisé KAM (Kriging Additive Model) basée sur une optimisation de type relaxation.

Exemple

L'algorithme proposé est comparé sur un exemple à une approche classique de modélisation par krigeage ainsi qu'à un modèle additif de type GAM. La fonction prise pour l'exemple est la g-fonction de Sobol' sur $[0, 1]^d$:

$$g(x_1, \dots, x_d) = \prod_{k=1}^d \frac{|4x_k - 2| + a_k}{1 + a_k} \quad (3)$$

Cette fonction étant débrayable en dimension, les tests sont effectués en dimension 4, 6 et 12 en prenant $a_k = k$. Les plans d'expérience utilisés sont des plans LHS comprenant $10 \times d$ points. Le tableau suivant donne les Q_2 obtenus sur un plan test de 1000 points tirés uniformément.

dimension	4	6	12
krigeage	0.76	0.74	0.66
GAM	0.91	0.91	0.89
KAM	0.93	0.88	0.87

Références

- [HT90] T.J. Hastie and R.J. Tibshirani. Generalized Additive Models, volume 43 of Monographs on Statistics and Applied Probability, 1990.
- [New94] W.K. Newey. Kernel estimation of partial means and a general variance estimator. *Econometric Theory*, pages 233–253, 1994.
- [Pla99] T.A. Plate. Accuracy versus interpretability in flexible modeling : Implementing a tradeoff using gaussian process models. *Behaviormetrika*, 26(1) :29–50, 1999.
- [Sto85] C.J. Stone. Additive regression and other nonparametric models. *The annals of Statistics*, 13(2) :689–705, 1985.