

Groupe Surfaces de réponse et métamodèles

3 décembre 2010

Jean-Marc Azaïs et Hervé Monod

Université de Toulouse et INRA Jouy en Josas

Méthodologie des surfaces de réponse (RSM)

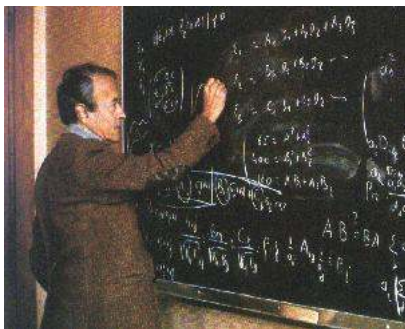
initiée en chimimétrie par les travaux de Box et Hunter sur les plans **iso-variants** pour des modèles polynômiaux essentiellement **quadratiques**.



G.E.P. Box (1919-)

Géostatistique et krigeage

développés en géologie minière par Georges Matheron :
essentiellement une méthode d'interpolation gaussienne.



G. Matheron (1930-2000)

→ méthodes présentées lors de la **Journée Statistique et Industrie de février 2006** à **Toulouse**, prémisses du GDR.

→ évolution du thème : essentiellement un mélange des deux approches avec des considérations sur :

- les plans d'échantillonnage (fixes ou séquentiels) ;
- la métamodélisation ;
- la réduction de dimension des entrées-sorties.

⇒ thème largement représenté dans les thèses, papiers, exposés, posters du GDR

Krigeage :

- modèle gaussien de type "modèle mixte", sur tout \mathbb{R} ou \mathbb{R}^d où d est la dimension de l'espace ambiant
- observations spatiales $Y(s_i)$, $s_i \in \mathbb{R}^d$
- espérance modélisée par un modèle paramétrique

$$E(Y(s_i)) = f(s_i, \theta),$$

polynômes orthogonaux, ondelettes, sinusoides, etc

- covariance entre observations modélisée à l'aide de paramètres : γ

$$\text{Var}(Y) = V(\gamma)$$

⇒ modèle dit mixte car il comprend des paramètres pour l'espérance et d'autres pour la variance



$$E(Y(s_i)) = f(s_i, \theta),$$



$$\text{Var}(Y) = V(\gamma)$$

- prédiction en s^* par régression Gaussienne
= BLUP, meilleur prédicteur linéaire dans un contexte non-gaussien :
⇒ interpolation des observations, c'est le krigeage !

Particularité du modèle de Krigeage :

doit se prolonger sur tout le domaine $\mathbb{R}^d \Rightarrow$ restrictions assez fortes sur la forme de $V(\gamma)$

Souvent : modèle de variance \rightarrow exponentiel avec ou sans erreurs de mesure

$$\text{Cov}(Y(s), Y(t)) = \exp \sum_{i=1}^d (\beta_i |s_i - t_i|^{\alpha_i}) + \gamma \mathbf{1}_{s=t}.$$

Directions actuelles et futures :

- généralisation et identification de ces modèles de variance
- autres méthodes d'interpolation \pm équivalentes

Sur la partie espérance, le krigeage retrouve les développements les plus actuels de la statistique

- la construction de bases orthogonales de fonctions : chaos polynômiaux, bases de Fourier, ondelettes.

Sur la partie espérance, le krigeage retrouve les développements les plus actuels de la statistique

- la construction de bases orthogonales de fonctions : chaos polynômiaux, bases de Fourier, ondelettes.
- les choix de modèles par pénalité L^0 : AIC BIC etc

Sur la partie espérance, le krigeage retrouve les développements les plus actuels de la statistique

- la construction de bases orthogonales de fonctions : chaos polynômiaux, bases de Fourier, ondelettes.
- les choix de modèles par pénalité L^0 : AIC BIC etc
- les choix de modèles par pénalité L^1 LASSO, Compress sensing, etc...

Sur la partie espérance, le krigeage retrouve les développements les plus actuels de la statistique

- la construction de bases orthogonales de fonctions : chaos polynômiaux, bases de Fourier, ondelettes.
- les choix de modèles par pénalité L^0 : AIC BIC etc
- les choix de modèles par pénalité L^1 LASSO, Compress sensing, etc...
- pour les sorties multivariées, les techniques de réduction de dimension ACP fonctionnelle, ACI, PLS, etc...

Le Krigeage peut être un outil de *construction de plans d'expériences séquentiels*

Méthode **du gain maximal** ou méthode de la **variance maximale** :

on peut rajouter des points séquentiellement à un plan initial pour

- optimiser une quantité : méthode du gain maximal
- ou bien prédire une fonction : il est naturel d'expérimenter là où la variance du Krigeage est la plus importante

Autres questions de planification :

- plans d'échantillonnage dans \mathbb{R}^m , m grand, pour construire un métamodèle : plans factoriels vs LHS vs nouveaux types de plans
- méthodes de type filtres particulières

En vue de la construction d'un métamodèle pour faire une "simulation de la simulation" les surfaces de réponse

- interviennent **à tous les niveaux** d'une expérience numérique
- sont souvent le passage obligé vers **l'analyse de sensibilité**
- dépendent de la planification avec un **feed-back**

Quelques points pour la réflexion :

- difficile d'isoler des recherches 100% surfaces de réponses
- la présence d'un groupe dévolu à cette activité est-elle indispensable au sein du GDR ?
- beaucoup de questions restent ouvertes et ce sera un des sujets de recherche des prochaines années