

Plans d'expériences adaptatifs pour le calcul de quantiles et application à la dosimétrie numérique

Marjorie Jala

Table des matières

1	Introduction	4
1.1	Contexte	5
1.2	Problématique	6
1.3	Contribution de la thèse	7
2	L'exposition des fœtus en dosimétrie numérique	10
2.1	L'exposition aux ondes électromagnétiques	11
2.1.1	L'exposition aux ondes, une préoccupation ancienne et nouvelle	11
2.1.2	La dosimétrie numérique	13
2.1.3	État de l'art sur l'exposition des fœtus en dosimétrie numérique	14
2.2	Utilisation de modèles de femmes enceintes simplifiés pour analyser l'exposition du fœtus	17
2.2.1	Le modèle de femme enceinte simplifié augmenté	17
2.2.2	Modèles de la femme enceinte japonaise hétérogène et semi homogénéisé	18
2.2.3	Influence de l'homogénéisation sur l'exposition du fœtus	18
2.2.4	Exposition du modèle de fœtus japonais inséré dans le modèle de femme enceinte synthétique augmenté	19
2.2.5	Conclusion	21
3	Processus gaussiens	25
3.1	Processus stochastiques gaussiens	26
3.2	Modélisation par des processus gaussiens en pratique	35
3.2.1	Fonctions de covariance	36
3.2.2	Simulation d'une trajectoire de processus gaussien	41
4	Méthodes de planification séquentielle d'expériences numériques pour l'estimation d'un quantile	44
4.1	Introduction	45
4.2	Méthodes GPS et GPS+	47
4.2.1	Méthode GPS	48
4.2.2	Méthode GPS+	52
4.3	Méthode SUR et variantes	54
4.3.1	Méthode SUR	55

4.3.2	Remarque : SUR “profond”	56
4.4	Adaptation de la méthode de Ranjan, Bingham et Michailidis	59
4.5	Preuves	65
5	Comparaison des méthodes sur des exemples numériques	71
5.1	Introduction	72
5.2	Comparaison des méthodes GPS et SUR	73
5.2.1	Exemples en dimensions $d = 1$ et $d = 2$	73
5.2.2	Exemple en dimension $d = 3$	73
5.3	Comparaison des méthodes GPS et RBM	75
5.4	Estimation des hyperparamètres	78
6	Application à la dosimétrie numérique	82
6.1	Exposition à une onde plane	83
6.1.1	La femme enceinte japonaise	83
6.1.2	Utilisation d’un modèle géométrique simplifié	96
6.2	Exposition à une source proche	105
6.2.1	La tablette Samsung	105
6.2.2	Exposition de Victoria et d’un fœtus de 31 semaines	107
7	Discussion et perspectives	111

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte

L'objectif de ce travail est l'estimation d'un quantile d'une variable aléatoire réelle $Y = f(X)$, où X est un vecteur aléatoire dont la distribution dans \mathbb{R}^d est supposée connue, et f est une fonction à valeurs réelles très coûteuse à évaluer. Cette modélisation $Y = f(X)$ est très commune pour représenter la sortie de codes de calculs numériques, et le problème d'estimation d'une fonction boîte-noire coûteuse à évaluer se retrouve dans de nombreuses applications (en fiabilité, exposition, etc...).

Notre domaine d'application est celui de la dosimétrie numérique : nous exposons virtuellement des modèles anatomiques de corps humains à des champs électromagnétiques engendrés par des équipements de communication sans fil, et ce afin d'évaluer la quantité d'énergie, transportée par le rayonnement électromagnétique, qui a été absorbée par les tissus humains. Ces équipements de communication sans fil sont, par exemple, des téléphones portables, des tablettes tactiles, des ordinateurs portables, qui utilisent des systèmes de transmission tels que le WIFI, le Bluetooth, ou des générations successives de systèmes de communication cellulaires... Les fréquences des champs émis appartiennent donc à la gamme des radiofréquences, et vont en particulier de 900 MHz (pour le GSM, *Global System for Mobile communications*), à 2600 MHz (pour le LTE, *Long Term Evolution*). Quant aux modèles numériques de corps humains, il s'agit de modèles en 3D construits pour la plupart à partir de données d'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) et de connaissances anatomiques. L'exposition d'un modèle de corps humain à un modèle de source d'onde électromagnétique est évaluée en résolvant les équations de Maxwell dans le corps. La résolution des équations de Maxwell est effectuée à l'aide d'une méthode de calcul de différences finies dans le domaine temporel (la FDTD, *Finite Difference Time Domain* ; voir [Taflove and Hagness, 2005]). La solution des équations de Maxwell permet de déterminer la distribution des courants et du champ électromagnétique dans le milieu, ce qui permet de déterminer la quantité d'énergie transportée par l'onde absorbée dans les tissus humains. Cette puissance absorbée permet de définir le Débit d'Absorption Spécifique, le DAS, exprimé en watts par kilogramme, qui représente la puissance absorbée par unité de masse. Le DAS est la quantité utilisée pour caractériser l'exposition aux ondes émises par les systèmes de communication sans fil ; c'est par exemple cette indication que l'on retrouve sur les téléphones portables, pour prouver leur conformité aux normes (qui suivent les recommandations de l'IC-NIRP, *International Commission on Non-Ionizing Radiation Protection*).

Dans notre cas, f modélise le DAS, et représente donc toutes les étapes de calcul numérique sur lesquelles nous n'interviendrons pas. Cette fonction est très complexe du fait de l'hétérogénéité du milieu de propagation ainsi que du couplage de l'émetteur (antenne) avec le milieu. Ceci justifie l'appellation de fonction boîte noire énoncée plus haut. Estimer un quantile de la distribution du DAS permet de connaître le niveau d'exposition. Malgré les progrès des performances des outils de calcul, il faut compter, selon les modèles utilisés, d'une à plusieurs heures pour l'évaluation d'une seule valeur de DAS ; le temps de calcul dépend à la fois du modèle de personne et du modèle de source utilisés : plus les modèles sont précis et plus le calcul sera long. De plus, la préparation d'une simulation peut nécessiter plusieurs heures s'il est nécessaire de déformer le modèle anatomique (c'est-à-dire bouger une ou plusieurs parties du corps) pour le placer dans une position précise, et s'il faut aussi positionner la source de façon précise. Ces dif-

ficultés permettent d'expliquer pourquoi la plupart des études de dosimétrie numérique menées précédemment se contentaient d'utiliser un modèle anatomique donné et une seule configuration de l'exposition (une position fixe pour le modèle de source et le modèle de personne). Cependant, il a été montré dans [Kientega et al., 2011], [Conil et al., 2008] et [El Habachi et al., 2010] que la morphologie, la posture et la position de la source influent sur l'exposition ; il est donc avéré que ce point de vue déterministe doit être dépassé si l'on veut avoir des informations pertinentes sur l'exposition, en gardant à l'esprit que le nombre de simulations qui peuvent être mises en œuvre est forcément restreint.

Pour avoir une estimation de la fonction f là où elle n'a pas été évaluée, une approche classique consiste à utiliser un métamodèle (on peut aussi parler de modèle de substitution, traduction littérale de *surrogate model*, ou de surface de réponse). Chez Orange, les travaux précédents se sont fondés sur l'utilisation de développements dans une base de chaos polynomial (voir par exemple [El Habachi et al., 2010]). Ces méthodes restent néanmoins très demandeuses en évaluations de la fonction f , même si l'on choisit un plan d'expériences avec de bonnes propriétés comme un hypercube latin (ou LHS, *Latin Hypercube Sampling*), ou un design optimal selon un critère donné, ou si l'on utilise une méthode qui facilite le calcul des coefficients des polynômes. De plus, cette approche revient à construire un estimateur global de la fonction inconnue f alors que notre objectif est d'estimer une fonctionnelle particulière de $f(X)$, en l'occurrence un quantile. L'estimation de la fonction sur l'ensemble de son domaine nécessite d'effectuer plus d'observations que d'utiliser une méthode dédiée à l'estimation d'un quantile.

1.2 Problématique

Nous cherchons donc à mettre en place une ou plusieurs méthodes dédiées à l'estimation d'un quantile de la distribution de $Y = f(X)$, en utilisant le moins possible d'évaluations de la fonction f . Pour cela, la voie des méthodes séquentielles de planification d'expériences est celle qui nous semble la plus appropriée. Dans cette approche, chaque point à ajouter à l'ensemble des observations qui ont déjà été effectuées, est sélectionné en optimisant un critère qui dépend de la quantité d'intérêt que l'on cherche à estimer. Ainsi, notre démarche sera la même que celle appliquée dans de nombreux problèmes (estimation du maximum de f , d'une probabilité $\mathbb{P}(Y \geq s)$ de dépasser un seuil s , etc.) : nous faisons l'hypothèse que la fonction f est la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien, et cette modélisation nous permet de calculer le critère qui va servir à déterminer le prochain point où f doit être évaluée. L'enjeu de ce travail est donc de proposer un critère simple à calculer et efficace qui permette d'estimer un quantile de $Y = f(X)$.

Notre application à la dosimétrie numérique porte en particulier sur l'exposition des fœtus ; l'objectif est d'évaluer le DAS (dans les tissus du fœtus) dans différentes configurations qui tiennent compte des nouveaux usages que la femme enceinte peut faire des technologies de l'information et de la communication (TIC, ou ICT en anglais, *Information and Communication Technologies*). Ce problème est une priorité de l'Organisation Mondiale de la Santé¹, car il a été

¹ voir p. 21 de http://whqlibdoc.who.int/publications/2010/9789241599948_eng.pdf

très peu étudié jusqu’alors ; par conséquent, les modèles de femmes enceintes et de fœtus pour la dosimétrie numérique sont très rares. Le travail mené au cours de cette thèse s’inscrit dans le cadre du projet ANR/JST FETUS², un projet collaboratif franco-japonais de 3 ans financé en partie par l’Agence Nationale de la Recherche pour les partenaires français et par la *Japan Science and Technology agency* pour les partenaires japonais. Ce cadre nous a permis de disposer d’un modèle de femme enceinte élaboré par l’équipe japonaise que nous utiliserons ici, ainsi que d’outils de déformation des modèles qui ont été développés dans le cadre de ce projet. Ces outils de déformation sont utiles d’une part pour faire varier la position de fœtus à l’intérieur de la mère (tâche très délicate), mais également pour modifier la posture de la femme enceinte afin qu’elle corresponde le mieux possible à un usage réel.

Nous précisons ici que l’étude de l’exposition n’a pas pour objectif de vérifier que les limites de l’ICNIRP que nous avons mentionnées plus haut sont respectées, et encore moins de discuter d’un éventuel effet sanitaire associé aux valeurs de DAS que nous allons évaluer. Les limites établies par l’ICNIRP sont des restrictions de base définies pour protéger les personnes des effets sanitaires connus avec une marge de sécurité importante. Les études de dosimétrie numériques sont motivées par le fait que, malgré ces limites de protection, les doutes persistent au sein de la population. Ainsi, au delà des questions de conformité aux normes, c’est bien la quantification de l’exposition réelle qui nous intéresse ici.

1.3 Contribution de la thèse

Les contributions de ce travail de thèse viennent, d’une part, de l’élaboration de méthodes séquentielles de planification d’expériences, et, d’autre part, de la mise en place d’applications de ces méthodes à la dosimétrie numérique, applications pour lesquelles nous avons réalisé une validation expérimentale de grande ampleur. Nos méthodes séquentielles pour l’estimation d’un quantile sont présentées dans le chapitre 4, puis comparées sur des exemples analytiques dans le chapitre 5. Quant à la dosimétrie numérique, après avoir étudié la validité d’un nouveau modèle de femme enceinte dans le chapitre 2, partie 2.2, nous montrons les résultats de nos applications dans le chapitre 6.

La première méthode séquentielle que nous avons étudiée est fondée sur l’utilisation d’un critère qui revient à minimiser la variance conditionnelle du quantile que l’on cherche à estimer, en faisant l’hypothèse que la fonction inconnue est la réalisation d’un processus Gaussien de fonction de covariance connue à des hyperparamètres près. Ainsi, nous avons adapté la stratégie SUR, “*Stepwise Uncertainty Reduction*”, présentée dans [Bect et al., 2012] pour l’estimation de la probabilité $\mathbb{P}(Y \geq s)$ de dépasser un seuil s donné, à l’estimation d’un quantile. Ces travaux reprennent en les étendant la méthode proposée dans [Arnaud et al., 2010], qui se concentre sur une application en dimension 1. Comme nous le verrons dans le chapitre 5, partie 5.2, cette méthode devient numériquement difficile à exploiter lorsque la dimension de l’espace des régresseurs augmente (en pratique, elle est déjà très coûteuse pour un modèle de dimension supérieure à deux). En effet, le calcul de la variance conditionnelle du quantile nécessite d’effectuer, pour

²voir p. 21 de <http://whist.institut-telecom.fr/fetus/index.html>

chaque point d'une grille, des tirages de Monte-Carlo. Le nombre de tirages par point de grille doit être suffisamment important pour obtenir une valeur informative. La complexité du calcul croît donc linéairement avec la taille de la grille et donc exponentiellement avec la dimension de l'espace.

Nous avons donc mis au point une autre méthode, dont l'objectif est de cibler les régions de l'espace de recherche où l'on a tout intérêt à choisir les observations de la fonction f si l'on veut estimer un quantile de $Y = f(X)$. Nous avons baptisé cette méthode GPS, pour *Gaussian Process Shrunk*. Nous l'avons testée ici jusqu'à la dimension 4 avec de très bons résultats, et sans aucune difficulté d'ordre computationnel ; en effet, le critère auquel nous faisons appel est très simple à calculer et ne nécessite pas de tirages de Monte-Carlo comme pour SUR. Nous proposons également une variante de GPS que nous nommons GPS+ ; cette variante s'avèrera au moins aussi efficace que GPS. Ces deux méthodes sont inspirées des algorithmes GP-UCB de [Srinivas et al., 2012] et *Branch and bounds* de [de Freitas et al., 2012], qui sont destinés à la recherche du maximum de la fonction f .

Nos méthodes GPS et GPS+ sont également comparées à une autre stratégie séquentielle, que nous appelons ici RBM (*Ranjan Bingham Michailidis*). Cette méthode, conçue pour l'estimation d'un contour, a été introduite dans [Ranjan et al., 2008] ; son objectif est de sélectionner des points x à observer tels que $f(x) = a$, où a est une valeur fixée. Dans la mesure où il est possible de voir un quantile de $Y = f(X)$ comme une ligne de niveau de la fonction f , on peut utiliser cette stratégie pour choisir des observations dans la zone d'intérêt pour l'estimation du quantile. Le problème vient du fait que, comme c'est justement cette valeur du quantile que l'on cherche à estimer, la valeur a qui est fixée pour un problème d'estimation de contour est dans notre cas inconnue. Nous proposons néanmoins d'essayer de remplacer a par l'estimateur du quantile que l'on calcule à chaque itération de l'algorithme. Les détails de cette stratégie se trouvent dans le chapitre 4, partie 4.4 ; comme les résultats que nous avons obtenus lors de l'application de RBM dans le chapitre 5, partie 5.3, ne se sont pas révélés satisfaisants, nous n'avons pas retenu cette méthode pour nos applications à de vrais problèmes de dosimétrie numérique.

Ces applications à la dosimétrie numérique sont l'objet du chapitre 6. Nous proposons ici deux applications, avec deux modèles de femmes enceintes et de fœtus différents (qui ont été présentés dans le chapitre 2), l'un exposé à une onde plane et l'autre à une source proche ; il sera question d'évaluer le quantile à 95% du DAS, soit dans le corps entier du fœtus, soit dans son cerveau (l'exposition du cerveau d'un organisme en développement fait évidemment partie des questions qui suscitent beaucoup d'intérêt).

Notre première application, présentée dans le chapitre 6, partie 6.1.1, est l'exposition d'un modèle de femme enceinte à une onde plane, pour laquelle nous avons réalisé 1000 simulations de dosimétrie numérique. Cet exemple était l'occasion de réaliser des tirages de Monte-Carlo pour vérifier les performances de notre méthode de planification séquentielle d'expériences GPS sur des données réelles. Ces 1000 simulations représentent un très gros budget, car elles nécessitent énormément de temps, ainsi que d'importantes ressources en termes de mémoire et de capacité de calcul. Nous avons obtenu des résultats très encourageants. Pour compléter cette application, dans la partie 6.1.2 nous avons proposé un modèle géométrique simplifié pour représenter le problème du fœtus exposé à une onde plane. Ce modèle nous a permis d'obtenir une expression analytique pour la puissance absorbée dans le fœtus, qui est rapide à évaluer et peut

donc être utilisé pour fournir des données synthétiques pour tester les méthodes. Évidemment, ce modèle très simplifié ne remplace absolument pas les simulations de dosimétrie numérique.

Enfin, nous nous sommes penchés sur un exemple plus compliqué à mettre en œuvre : celui d'un modèle de femme enceinte assis tenant une tablette tactile. Cette fois-ci nous avons donc utilisé une source proche (la tablette) et nous nous sommes intéressés uniquement à l'exposition du cerveau du fœtus. Pour cette application, nous avons utilisé un modèle de femme enceinte semi-homogène, c'est-à-dire dont les organes ne sont pas tous différenciés. Nous expliquons comment ce modèle a été construit et comment nous avons validé son utilisation pour la dosimétrie numérique dans le chapitre 2, partie 2.2 ; ces travaux ont fait l'objet d'une publication (voir [Jala et al., 2013]). L'avantage principal d'un tel modèle est qu'il permet de réduire les temps de calcul lors de la simulation de dosimétrie numérique ; néanmoins, pour notre exemple avec la tablette, pour obtenir une seule valeur du DAS il fallait compter environ sept heures (et ce sans tenir compte du temps de préparation du modèle). Pour notre planification séquentielle d'expériences, nous choisissons d'appliquer notre méthode GPS+ ; nous avons obtenus de bons résultats, qui sont détaillés dans le chapitre 6, partie 6.2.

En complément de ces chapitres où nous exposons nos contributions, nous ajoutons un rappel sur les processus gaussiens et leurs propriétés dans le chapitre 3, ce qui contribue à justifier la modélisation de $Y = f(X)$ sur laquelle repose nos méthodes séquentielles. Dans le chapitre 2, partie 2.1, nous apportons des détails sur les enjeux de la dosimétrie numérique et en particulier l'application au problème de l'exposition des fœtus. Enfin, le chapitre 7 conclut ce travail de thèse.

Chapitre 2

L'exposition des fœtus en dosimétrie numérique

Résumé

Ce chapitre est consacré d'une part à la présentation du contexte global qui entoure le problème de l'exposition du fœtus aux ondes électromagnétiques, et d'autre part à la validation de l'utilisation d'un modèle de femme enceinte simplifié pour la dosimétrie numérique, modèle que nous allons utiliser dans nos applications du chapitre 6. Nous expliquerons brièvement en quoi consiste la dosimétrie numérique, et nous présenterons un état de l'art des études qui ont été menées en dosimétrie numérique pour étudier l'exposition des fœtus. Puis nous reprendrons nos travaux (qui ont fait l'objet d'une publication, voir [\[Jala et al., 2013\]](#)) sur l'utilisation de modèles de femmes enceintes simplifiés lorsque l'on s'intéresse à l'exposition du fœtus.

2.1 L'exposition aux ondes électromagnétiques

Dans cette partie, après avoir rappelé le contexte scientifique, politique et réglementaire de l'exposition aux ondes électromagnétiques, nous rappellerons brièvement le principe de la dosimétrie numérique. Puis nous nous présenterons les études qui ont été menées en dosimétrie numérique pour étudier l'exposition des fœtus.

2.1.1 L'exposition aux ondes, une préoccupation ancienne et nouvelle

L'exposition aux ondes électromagnétiques non ionisantes est une préoccupation à la fois ancienne et nouvelle. Ancienne, car depuis 1996 l'Organisation Mondiale de la Santé a mis en place le projet EMF (*ElectroMagnetic Fields*) pour évaluer les risques sanitaires et la validité des limites de protection. Les principaux aspects de ce projet sont la mise en place d'une base de données¹ qui répertorie les recherches menées sur le thème de l'exposition aux ondes, et la mise en place d'un agenda² qui identifie et recommande les études à mener. Mais il s'agit également d'une préoccupation relativement nouvelle au sein du grand public, car les technologies de l'information et de la communication ainsi que leurs usages se sont multipliés ces dernières années, et sont par conséquent utilisées par un nombre toujours croissant de nouveaux usagers.

En effet, le Centre International de Recherche sur le Cancer (le CIRC, en anglais IARC, *International Agency for Research on Cancer*) de l'OMS a classé en 2011 les champs électromagnétiques radiofréquences (émis par les téléphones portables, les stations de base, le WIFI, etc.) parmi les cancérigènes possibles pour l'homme (groupe 2B). Cette classification souligne le fait qu'il est nécessaire de poursuivre les recherches afin de mieux documenter le risque, car, malgré les études qui ont été menées jusqu'alors, des incertitudes subsistent. Ces études ont été et sont menées selon différents points de vue : dosimétrie numérique comme dans notre cas, mais également études *in vitro* (recherche de l'influence des champs électromagnétiques sur les cellules), études *in vivo* (sur les plantes, les animaux et les hommes), et enfin études épidémiologiques.

Comme nous l'avons dit dans l'introduction de cette thèse, l'objectif de ce travail n'étant pas de déduire un effet sanitaire causé par une exposition aux champs électromagnétiques, nous n'allons pas détailler ces études et leurs résultats. Nous pouvons simplement retenir que les études *in vitro* et *in vivo* n'ont pas mis en évidence d'autre phénomène qu'un effet thermique. Cependant, certaines études épidémiologiques ont observé une (faible mais néanmoins crédible) augmentation du risque de gliome (tumeur au cerveau) associée à une utilisation importante du téléphone portable ; c'est ce risque qui a notamment motivé la classification des champs électromagnétiques dans le groupe 2B. La Monographie du CIRC³ présente une liste exhaustive des publications (plus d'une centaine) qui ont été considérées pour établir cette classification ; elles se fondent pour beaucoup d'entre elles sur les résultats de l'étude Interphone, une étude épidémiologique lancée par le CIRC en 2000 dans 14 pays. Nous remarquerons enfin que malgré le

¹<http://apps.who.int/peh-emf/research/database/emfstudies/>

²http://whqlibdoc.who.int/publications/2010/9789241599948_eng.pdf

³*IARC Monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans*, Volume 102 (2013), Non-ionizing radiations part 2 : radiofrequency electromagnetic fields, <http://monographs.iarc.fr/ENG/Monographs/vol102/mono102.pdf>

risque établi dans ces études, comme le seul phénomène avéré est un effet thermique, un lien de cause à effet ne peut être établi et les incertitudes persistent.

À ces incertitudes s'ajoutent, comme le montrent les sondages de l'Eurobaromètre (sondages commandés par la commission européenne) sur les champs électromagnétiques⁴, une confusion du grand public entre exposition à une source proche comme par exemple un téléphone mobile, et exposition à une source plus lointaine comme une station de base (antenne relais), ce qui entretient les inquiétudes. Il faut savoir que l'exposition à une station de base est très largement inférieure à celle induite par une utilisation d'un téléphone mobile ; on peut le voir en comparant les valeurs mesurées au limites de protection établies par l'ICNIRP (*International Commission on Non-Ionizing Radiation Protection*) dans [ICNIRP, 1998]. Ces limites sont des recommandations pour protéger les personnes des effets sanitaires connus, avec une marge de sécurité de 50 (pour le grand public, les limites étant différentes pour les travailleurs). D'une part, pour que l'augmentation de la température corporelle ne dépasse pas 1 °C chez la personne exposée, le DAS corps entier ne doit pas dépasser 0.08 W.kg⁻¹. D'autre part, le DAS local moyenné sur 10 grammes de tissus ne doit pas dépasser 2 W.kg⁻¹, car on a constaté des problèmes de cataractes chez les lapins exposés à hauteur de 100 W.kg⁻¹. Le rapport de 2007 de l'Agence Nationale des Fréquences⁵ (ANFR) montre que l'exposition moyenne induite par une antenne ou un point d'accès varie entre 1000 et 100000 fois en dessous des normes. Pour les téléphones mobiles, au-delà des valeurs données par le fabricant pour une utilisation à puissance maximale (qui sont de l'ordre de 1 W.kg⁻¹), si l'on tient compte des équipements (WIFI, Bluetooth, etc.) et des différents usages (on tient le téléphone plus ou moins loin de soi), l'exposition moyenne varie entre 2 et 50 fois en dessous de normes.

Ces confusions contribuent à faire de l'exposition aux ondes un véritable enjeu politique. On peut citer par exemple le Grenelle des ondes, débat dont l'un des objectifs était de répondre aux inquiétudes de l'opinion, qui a eu lieu en 2009. Ou encore la charte de la mairie de Paris, signée entre la Ville de Paris et les quatre opérateurs mobile, dont l'objectif est de garantir des niveaux d'exposition aussi bas que possible, pour une couverture optimale du réseau. Au niveau européen, outre les déclarations du Parlement, l'agence européenne de l'environnement (en anglais EEA, *European Environment Agency*) prône le principe de précaution à travers un rapport⁶ qui donne quelques indications pour réduire son exposition aux émissions du téléphone mobile.

En ce qui concerne la responsabilité des opérateurs de téléphonie mobile, Orange mène une recherche active depuis 20 ans dans le domaine de la dosimétrie numérique. Ces recherches ont donné lieu à de nombreux projets collaboratifs, comme par exemple le projet ANR-JST Fetus dans lequel s'inscrit cette thèse. La liste de tous les projets est disponible sur le site de Whist Lab⁷, laboratoire commun de l'Institut Mines-Télécom et d'Orange dédié à la recherche sur les interactions entre ondes et personnes.

La mise en commun de tous ces moyens a notamment permis une évolution d'une vision déterministe de la dosimétrie à une vision stochastique, rendue possible par l'augmentation des moyens de calculs et du nombre de modèles anatomiques disponibles. Les temps de calcul et de

⁴http://ec.europa.eu/public_opinion/archives/ebs/ebs_347_fr.pdf

⁵<http://www.anfr.fr/fileadmin/mediatheque/documents/espace/synthese07.pdf>

⁶<http://www.eea.europa.eu/publications/late-lessons-2>

⁷<http://whist.institut-telecom.fr/>

préparation restent élevés, mais on peut prendre en compte la variabilité pour des problèmes plus complexes. Néanmoins, avant de passer aux applications dans le chapitre 6, nous allons rappeler ici les principes de la dosimétrie numérique, et passer en revue les études (toutes déterministes) qui ont été menées auparavant sur l'exposition du fœtus. Puis nous présenterons les modèles que nous avons utilisé pour nos applications, et en particulier le travail effectué pour valider l'utilisation d'un modèle de femme enceinte simplifié pour la dosimétrie numérique.

2.1.2 La dosimétrie numérique

Les ondes électromagnétiques se propagent dans le vide, sans transport de matière mais avec transport d'énergie. Elles sont constituées d'un champ électrique, E , exprimé en volt par mètre, et d'un champ magnétique, H , exprimé en ampère par mètre. L'énergie transportée par l'onde, la densité surfacique de puissance associée, exprimée en watt par mètre carré, est liée aux champs électriques et magnétiques. Loin des sources (c'est-à-dire des antennes), les ondes électromagnétiques ont une structure d'onde plane. Près des sources, la structure des ondes électromagnétiques est beaucoup plus complexe.

Le spectre des ondes électromagnétiques permet de discerner les différents types de rayonnements, en particulier les rayonnements ionisants, aux très hautes fréquences (supérieures à 30 PHz, pétahertz, 10^{15} Hz), qui sont capables de déposer assez d'énergie dans la matière qu'ils traversent pour provoquer une ionisation ; et les rayonnements non-ionisants, dont les fréquences sont donc inférieures au spectre de la lumière visible. Les ondes radio qui nous intéressent ici appartiennent à cette dernière catégorie. En particulier, nos applications seront réalisées aux fréquences des télécommunications, qui regroupent GSM (*Global System for Mobile communications*, 900 et 1800 MHz), UMTS (*Universal Mobile Telecommunications System*, 900 et 2100 MHz), LTE (*Long Term Evolution*, 1800 et 2600 MHz) ou encore le Wi-Fi (marque déposée dont le nom est communément utilisé pour désigner les systèmes WLAN, *Wireless Local Area Network*, 2400 MHz et 5 GHz).

Quand une onde électromagnétique traverse une personne, une partie de l'énergie transportée par cette onde est réfléchiée et une autre va se propager dans les tissus biologiques. Les tissus absorbent alors une partie de l'énergie transportée par le champ électromagnétique. Cette puissance absorbée caractérise le niveau d'exposition qui est quantifié par le débit d'absorption spécifique (DAS). Le DAS exprimé en watt par kilogramme indique la puissance absorbée par unité de masse, il est proportionnel au carré du champ électrique dans les tissus. Il est défini par :

$$DAS = \frac{\sigma E^2}{2\rho}, \quad (2.1)$$

avec σ la conductivité du milieu (en siemens par mètre), ρ sa densité (en kilogramme par mètre cube) et E la valeur du champ électrique (en volt par mètre). On peut également le voir, en particulier dans le calcul du DAS corps entier, comme la puissance totale absorbée P_{abs} (en watt) divisée par la masse m (en kilogramme).

Pour la dosimétrie numérique, nous avons besoin à la fois de modèles de corps humains et de modèles de sources d'ondes électromagnétiques. Ces modèles anatomiques de corps humain

sont des modèles hétérogènes, c'est-à-dire composés de plusieurs tissus biologiques, avec plus ou moins de précision. Ils sont construits, pour la plupart, à partir de données provenant d'exams IRM (Imagerie par Résonance Magnétique), qui sont ensuite segmentées, ce qui signifie que chaque organe est identifié. La segmentation d'images est une opération délicate qui devrait pouvoir se faire avec des algorithmes de traitement d'images, mais qui sera en pratique complétée manuellement dans un cas aussi complexe que celui d'un corps humain. Ces difficultés, qui s'ajoutent au petit nombre de données disponibles et des problèmes éthiques qui entourent leur exploitation, permettent d'expliquer pourquoi si peu de modèles sont disponibles. En effet, au niveau international, on dispose d'une vingtaine de modèles anatomiques de corps humain pour la dosimétrie numérique ; cependant, des techniques telles que le "*morphing*" permettent de modifier la morphologie externe de ces modèles et ainsi d'étoffer cette base de données (voir [El Habachi et al., 2010]).

Quant aux modèles de sources, on peut en distinguer deux sortes. Les sources lointaines, pour lesquelles on pose une hypothèse de champ lointain qui consiste en une approximation par des ondes planes. Ces sources lointaines représentent l'exposition à des antennes de stations de base, sur la bande de fréquence de 900 à 2400 MHz. D'autre part, les sources proches sont constituées par des modèles numériques en 3D de téléphones mobiles, de tablettes, d'ordinateurs portables.

Pour évaluer le DAS dans les tissus d'un modèle de corps humain exposé à une source d'ondes électromagnétique, il faut résoudre les équations de Maxwell, qui décrivent la propagation des ondes dans les milieux. Dans le cas de la dosimétrie numérique, la méthode la plus couramment utilisée est la FDTD (*Finite Difference Time Domain*), car elle est bien adaptée pour résoudre ces problèmes fortement hétérogènes (voir [Taflove and Hagness, 2005]).

Les quantités d'intérêts que l'on peut évaluer pour quantifier l'exposition sont le DAS corps entier, qui est le DAS dans tout le corps du modèle considéré, le "DAS 10g", le DAS moyenné sur 10 grammes de tissu car c'est celui qui est utilisé pour les normes, mais également le DAS dans un organe en particulier, comme le cerveau. Même si, lors de nos applications du chapitre 6, nous allons évaluer ces trois données, nous nous concentrerons surtout sur le DAS corps entier du fœtus, et sur le DAS dans son cerveau.

2.1.3 État de l'art sur l'exposition des fœtus en dosimétrie numérique

Comme nous l'avons expliqué précédemment, pour étudier l'exposition du fœtus aux champs électromagnétiques du point de vue de la dosimétrie numérique, nous allons avoir besoin de modèles voxélisés de femmes enceintes. Les modèles voxélisés en général sont construits à partir de données d'Imagerie par Résonance Magnétique. Cependant, le cas de la femme enceinte est particulier car il n'existe pas de "vrai" modèle corps entier. En effet, les exams IRM chez une femme enceinte sont rares et les données acquises ne sont en général pas exploitables à cause des mouvements fœtaux pendant la durée de l'examen. Ainsi, pour disposer de modèles de femmes enceintes utilisables en dosimétrie numérique, des modèles de fœtus (construits pour la plupart à partir de données d'échographie) ont été insérés dans des modèles de femmes non enceintes. Nous allons présenter ici des modèles qui ont déjà été utilisés en dosimétrie numérique.

Le modèle représenté dans la figure 2.1 (a) a été créé par [Xu et al., 2007] . Il combine un modèle de femme synthétique, dont les organes et le squelette viennent du modèle voxélisé

construit à partir des photographies de coupes histologiques de Visible Human⁸, à des modèles de fœtus synthétiques également, à 13, 26 et 38 semaines d'aménorrhée. Pour ces modèles, le placenta est confondu avec la paroi utérine, et le liquide amniotique, ainsi que cerveau et le squelette du fœtus sont différenciés. Le reste des tissus est homogène.

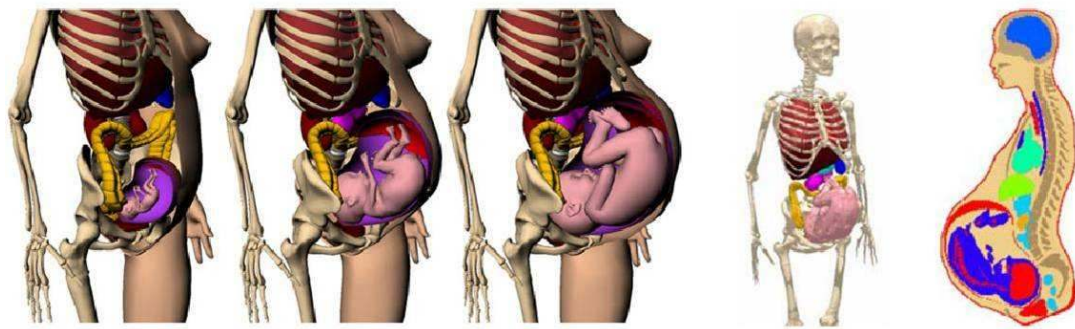
Le modèle représenté dans la figure 2.1 (b) a été créé par [Dimbylow, 2006]. Le modèle de femme non gravide utilisé est un modèle hétérogène voxélisé nommé Naomi : les organes sont bougés pour insérer le fœtus. Les fœtus utilisés sont dits stylisés : on voit dans la figure 2.1 (b) qu'il s'agit de représentations géométriques simplifiées du fœtus à 8, 13, 26, 38 semaines d'aménorrhée. L'unité utéro-placento-fœtale est également constituée de la paroi utérine, du placenta, du liquide amniotique, ainsi que du cerveau et du squelette du fœtus ; le reste des tissus est indifférencié. Les dimension et masse de chaque partie sont des valeurs de référence données dans [Valentin, 2002]. Ce modèle permet de considérer aisément deux positions du fœtus : tête en haut et en bas. Une utilisation de ces modèles en dosimétrie numérique est donnée dans [Dimbylow, 2007].

Le modèle représenté dans la figure 2.1 (c) a été créé par [Nagaoka et al., 2008]. Le modèle de femme non gravide utilisé est un modèle hétérogène voxélisé nommé Tanako, dont la morphologie est similaire à la moyenne japonaise ; ce modèle a été présenté dans [Nagaoka et al., 2004]. Le modèle Tanako est combiné avec un modèle d'unité utéro-placento-fœtale voxélisé, construit à partir d'un examen IRM à 26 semaines. Le modèle original comprend donc un fœtus à 26 semaines d'aménorrhée dont le cerveau et les yeux sont différenciés, la paroi utérine, le placenta et le liquide amniotique. Une mise à l'échelle de cette unité utéro-placento-fœtale permet d'obtenir deux modèles supplémentaires, à 13 et 20 semaines d'aménorrhée. Une seule position du fœtus peut être considérée ici (tête en bas). Les résultats obtenus pour l'exposition du modèle de femme enceinte et son fœtus de 26 semaines ont été présentés dans [Nagaoka et al., 2007], et comparés à ceux de [Dimbylow, 2007] dans [Dimbylow et al., 2008].

Le modèle représenté dans la figure 2.1 (d) a été créé par [Kawai et al., 2010]. Il s'agit du même modèle de femme non enceinte que précédemment (la femme japonaise Tanako), mais pour deux modèles de fœtus différents : un cube homogène représentant un fœtus à 4 semaines d'aménorrhée, et un ellipsoïde de révolution représentant un fœtus à 8 semaines d'aménorrhée. Trois implantations différentes sont considérées : centre, avant et arrière de l'utérus.

Les modèles que nous recensons ici sont donc les seuls pour lesquels des études de dosimétrie numérique ont été menées aux fréquences des télécommunications. On remarque que le seul modèle construit à partir d'un vrai fœtus est celui du modèle de [Nagaoka et al., 2007] (le modèle de fœtus de 26 semaines construit à partir de données d'IRM). D'autres modèles de fœtus, construits à partir de données d'échographie ou d'IRM, existent cependant. L'objet de la partie suivante est de montrer comment nous allons pouvoir utiliser ces modèles pour la dosimétrie numérique, en les insérant dans un modèle de femme enceinte simplifié.

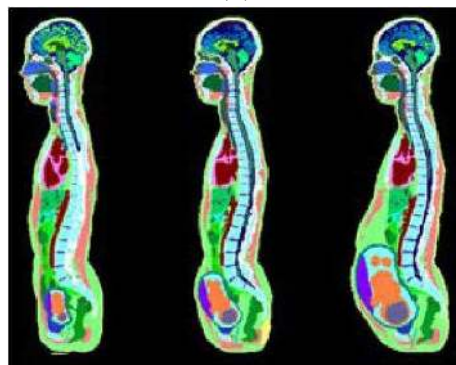
⁸pour des explications sur le projet Visible Human, voir par exemple http://www.nlm.nih.gov/research/visible/visible_human.html



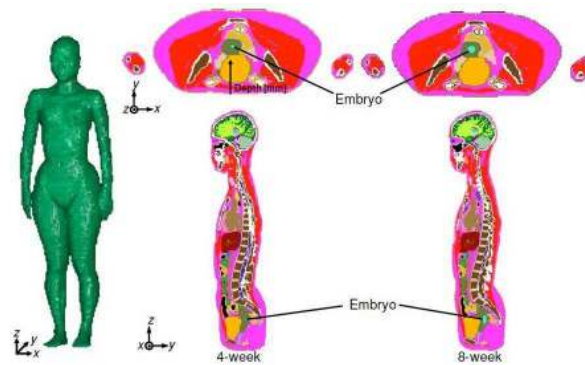
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 2.1 – Modèles de femmes enceintes utilisés en dosimétrie numérique. (a) [Xu et al., 2007], (b) [Dimbylow, 2006], (c) [Nagaoka et al., 2008], (d) [Kawai et al., 2010].

2.2 Utilisation de modèles de femmes enceintes simplifiés pour analyser l'exposition du fœtus

Cette section reprend l'article [Jala et al., 2013]

Comme nous l'avons vu précédemment, peu de modèles de femme enceinte sont disponibles, et même s'il est possible d'insérer un fœtus dans un modèle hétérogène de femme non enceinte, plusieurs problèmes se posent. D'une part, insérer le fœtus en déformant de façon réaliste les tissus viscéraux de la mère est très compliqué. D'autre part, dans le but de créer une application proche de la réalité, on peut souhaiter bouger le fœtus alors qu'il est placé dans le modèle de la mère, ce qui va encore poser des problèmes pour déformer les organes de la mère qui vont être affectés par le mouvement du fœtus.

Nous avons donc cherché un moyen de surmonter ces difficultés car notre objectif est de prendre en compte autant que possible la variabilité qui existe dans la réalité. L'utilisation d'un modèle de femme enceinte simplifié est donc la solution que nous étudions ici. La simplification consiste à homogénéiser la plupart des tissus de la mère dans la zone proche du fœtus, en ne gardant que la peau, la graisse sous-cutanée, les muscles et les os. Nous allons voir si un tel modèle peut être utilisé en dosimétrie numérique.

2.2.1 Le modèle de femme enceinte simplifié augmenté

Le modèle dont nous souhaitons valider l'utilisation a été construit à partir d'un modèle de femme non enceinte, nommé Victoria, et distribué par DAZ 3D Studio⁹. Ce modèle synthétique a été modifié pour lui ajouter des tissus qui apparaissent importants dans le cadre de l'exposition du fœtus aux ondes radiofréquences : une couche de peau, une couche de graisse sous-cutanée, une couche de muscle, et enfin les os du bassin et de la colonne vertébrale.

Dans ce modèle simplifié augmenté, 16 unités utéro-placento-fœtales (UUPF) avec des fœtus âgés de 8 à 35 semaines d'aménorrhée peuvent être insérés. Ces UUPF ont été créées grâce aux projets collaboratifs Femonum¹⁰ et Fetus¹¹. Une UUPF est composée de la paroi utérine, du liquide amniotique, du placenta, du cordon ombilical, et du fœtus, dont certains tissus sont différenciés : selon les modèles, on peut avoir le cerveau, la moelle épinière, le cœur, les yeux et les poumons.

L'utilisation de ce modèle simplifié augmenté présente plusieurs avantages, en commençant par celui de permettre de s'affranchir du problème de la déformation des organes avoisinant l'UUPF lorsque le fœtus est inséré ou change de position. De plus, il est possible de faire varier l'épaisseur des couches de graisse sous cutanée et de muscle, ce qui offre la possibilité d'envisager une étude sur l'influence de ces caractères morphologiques de la mère sur l'exposition du fœtus. Le fœtus du modèle de la femme enceinte japonaise hétérogène (que nous allons décrire dans la suite) a été inséré dans Victoria augmentée, voir la figure 2.2 (a).

⁹<http://www.daz3d.com/shop/>

¹⁰<http://femonum.telecom-paristech.fr/index.html>

¹¹<http://whist.institut-telecom.fr/fetus>

2.2.2 Modèles de la femme enceinte japonaise hétérogène et semi homogénéisé

Pour valider que l'utilisation d'un modèle simplifié augmenté semi-homogène tel que nous l'avons présenté est pertinente dans le cadre d'une étude de dosimétrie numérique, nous allons mener une comparaison en prenant comme référence le modèle de la femme enceinte japonaise. Ce modèle a été créé par [Nagaoka et al., 2007] en insérant un fœtus de 26 semaines (dont le cerveau et les yeux sont différenciés) dans un modèle de femme non enceinte réalisé par [Nagaoka et al., 2004] (voir la figure 2.2 (b)). Le modèle initial, nommé Tanako, a été construit de façon à correspondre aux mensurations moyennes des Japonaises.

Ce modèle hétérogène de femme enceinte va donc être partiellement homogénéisé (voir la figure 2.2 (c)), sur le modèle de Victoria, c'est-à-dire en ne gardant que la peau, la graisse sous cutanée, les muscles et les os de la colonne vertébrale. Cette manipulation est d'autant plus utile qu'elle va nous permettre d'obtenir les propriétés diélectriques à appliquer au tissu homogène dans notre modèle simplifié augmenté. Ces propriétés diélectriques vont être calculées en effectuant une simple moyenne algébrique des permittivités et des conductivités des tissus entourant l'UUPF, à l'exception, bien sûr, des tissus que nous venons de citer et qui doivent rester différenciés (voir le tableau 2.1). Dans la mesure où notre étude porte uniquement sur l'exposition du fœtus (et non de la mère), on peut supposer qu'il est plus pertinent de prendre en compte uniquement les tissus situés dans une zone proche de l'UUPF, comme on peut le voir la figure 2.3. Les propriétés diélectriques du tissu homogène aux fréquences d'intérêt pour les télécommunications (celles pour lesquelles nous allons réaliser des simulations de dosimétrie numérique) se trouvent dans le tableau 2.2.

Les valeurs de conductivité et de permittivité du tissu équivalent pour les fréquences que nous considérons sont assez faibles, surtout si, comme dans le tableau 2.2, on les compare aux propriétés du liquide équivalent que l'on utilise pour un modèle entièrement homogène si l'on suit les recommandations de l'IEC¹² (*International Electrotechnical Commission*). Cela s'explique avec les résultats du tableau 2.1, qui montrent que le fœtus est majoritairement entouré par la graisse viscérale de la mère (la graisse compte pour près de 80% de notre tissu homogène). Cela confirme l'intérêt de ne pas se contenter du tissu équivalent habituel pour utiliser un modèle semi-homogène lorsque l'on s'intéresse à l'exposition du fœtus.

2.2.3 Influence de l'homogénéisation sur l'exposition du fœtus

Nous allons maintenant comparer les modèles de la femme enceinte japonaise hétérogène et semi-homogénéisé d'un point de vue de l'exposition du fœtus. Ceci est la première étape pour valider l'utilisation d'un modèle semi-homogène, et pour l'instant il n'est pas encore question du modèle synthétique augmenté Victoria. Le modèle de référence hétérogène et sa version semi-homogénéisée sont donc exposés à des ondes planes, de polarisation verticale, pour sept angles d'arrivée différents, voir la figure 2.4. Cette expérience est répétée aux fréquences usuelles pour les télécommunications, 900, 1800, 2100 et 2400 MHz.

¹²<http://www.iec.ch/index.htm>

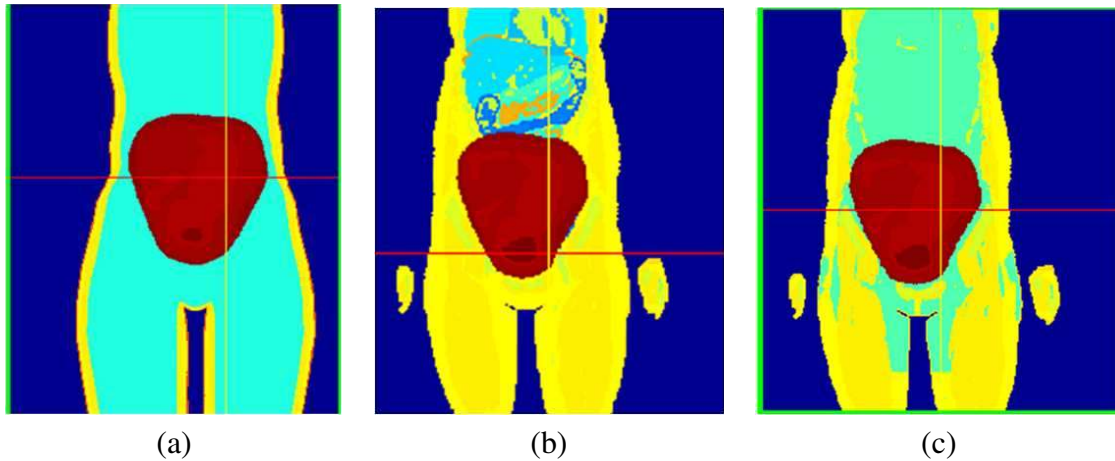


FIGURE 2.2 – (a) Modèle simplifié augmenté, (b) Modèle hétérogène de la femme enceinte japonaise, (c) modèle semi-homogène de la femme enceinte japonaise.

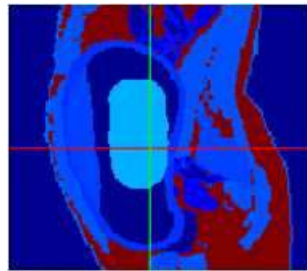


FIGURE 2.3 – Partie du corps de la mère dont les tissus ont été pris en compte pour le calcul des propriétés diélectriques du tissu homogène.

Les résultats sont représentés dans la figure 2.5. On remarque que les valeurs obtenues pour le modèle hétérogène et pour le modèle semi homogène s'accordent bien ; en effet, sur toutes les simulations réalisées, on n'observe pas plus de 15% de différence pour les deux modèles. Cela nous permet de conclure que l'utilisation d'un modèle semi homogénéisé est pertinente dans le cadre de l'exposition du fœtus, pour les fréquences que nous avons considérées ici.

Voyons à présent les résultats que l'on obtient en exposant notre modèle synthétique augmenté dans les mêmes conditions.

2.2.4 Exposition du modèle de fœtus japonais inséré dans le modèle de femme enceinte synthétique augmenté

Notre objectif ici est de valider l'utilisation d'un modèle de femme enceinte synthétique augmenté pour la dosimétrie numérique, aux fréquences des télécommunications. Ainsi, nous avons inséré le fœtus japonais de 26 semaines dans Victoria en essayant de voir si nous étions capables d'obtenir des valeurs de DAS corps entier similaires à celles obtenues avec le modèle de femme

Tissu	Proportion
Diaphragme (muscle)	0.0682
Vessie	0.0061
Colon	0.0427
Duodenum	0.017
Rein	0.0234
Foie	0.0013
Ovaire	0.0057
Intestin grêle	0.0332
Cartilage	0.0165
Graisse	0.7973
Nerf	0.0039

TABLE 2.1 – Proportion des tissus de la mère situés autour de l’UUPF.

Fréquence (MHz)	Tissu homogène		Tissu équivalent IEC	
	Permittivité (S.m ⁻¹)	Conductivité relative	Permittivité (S.m ⁻¹)	Conductivité relative
900	15.4	0.28	41.4	0.97
1800	14.8	0.40	40.0	1.40
2100	14.6	0.45	39.8	1.49
2400	14.5	0.50	39.2	1.80

TABLE 2.2 – Propriété diélectriques du tissu homogène, comparées à celles du tissu équivalent de l’*International Electrotechnical Commission*.

enceinte japonaise. Cependant, la première chose que l’on peut remarquer en regardant les deux modèles (voir la figure 2.6), c’est que leurs morphologies sont très différentes, en particulier dans la région des hanches. Ainsi, nous allons procéder à quelques modifications sur le modèle synthétique augmenté afin de le rendre un peu plus proche de la femme japonaise pour que les valeurs de DAS puissent être comparées. Le modèle synthétique peut donc être élargi, comme on le voit dans la figure 2.6 ; pour cela on a utilisé un outil de déformation développé par Télécom ParisTech sur la plateforme SOFA¹³.

Ce nouveau modèle est exposé dans les mêmes conditions que les deux précédents, en appliquant les mêmes propriétés diélectriques pour les tissus. Les résultats sont représentés dans la figure 2.7. Le comportement général est similaire pour le modèle synthétique, excepté pour des valeurs singulières observées à l’azimut 0 degré, pour les fréquences 1800, 2100 et 2400 MHz. Les niveaux d’exposition sont inférieurs également : en comparant la figure 2.5 et la figure 2.7, on remarque que le DAS corps entier dans le fœtus est plus faible lorsque l’on utilise le modèle synthétique augmenté.

Pour expliquer ces résultats, le premier argument que l’on peut avancer est bien évidemment

¹³Simulation Open Framework Architecture, <http://www.sofa-framework.org/>

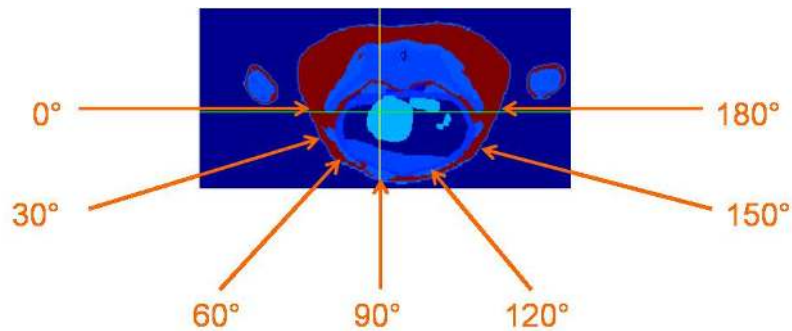


FIGURE 2.4 – Directions d'arrivée de l'onde incidente dans le plan horizontal.

les morphologies très différentes des deux modèles de femmes enceintes. En effet, comme on peut le voir dans la figure 2.8, dans le modèle japonais la couche de muscle n'est pas continue, et la couche de graisse est parfois trop épaisse sur le modèle synthétique augmenté. De plus, le modèle synthétique augmenté Victoria possède une couche de graisse sous-cutanée sur le devant du ventre qui n'existe pas sur le modèle de la femme enceinte japonaise, ce modèle possédant très peu de graisse sous cutanée sur le ventre. Ainsi, dans le cas du modèle Victoria, l'énergie transportée par l'onde incidente lorsqu'elle atteint le fœtus est plus faible que dans le cas du modèle de la femme enceinte japonaise, car la couche de graisse a contribué à une absorption plus importante de l'énergie ; cela explique les niveaux d'exposition plus faibles du fœtus japonais constatés lorsque celui-ci est placé dans Victoria. Cette répartition de la graisse sous-cutanée, très différente pour les deux modèles, peut également expliquer les valeurs singulières observées à l'azimut 0 degré, pour les fréquences 1800, 2100 et 2400 MHz. Ainsi, si le modèle de la femme japonaise possède très peu de graisse sous-cutanée sur le devant du ventre, il n'en est pas de même sur les côtés, où la couche de graisse est plus épaisse que sur le modèle synthétique semi-augmenté Victoria. Par conséquent, si l'on veut recréer les résultats de DAS dans le fœtus obtenus avec le modèle de la femme enceinte japonaise en utilisant le modèle Victoria, il faudrait passer beaucoup de temps à modifier la morphologie de ce dernier, et de remplacer la couche uniforme de graisse sous-cutanée par une couche irrégulière, très fine sur l'avant du ventre, plus épaisse sur les côtés, et encore plus épaisse dans le dos. Ce travail fastidieux ne présente pas d'intérêt dans le cadre de notre étude, dont l'objectif n'est pas de reproduire le modèle de la femme enceinte japonaise, mais bien de disposer d'un modèle de femme enceinte réaliste et utilisable pour la dosimétrie numérique.

2.2.5 Conclusion

Dans cette étude, notre objectif est de vérifier que le modèle de femme enceinte simplifié Victoria est représentatif du point de vue de l'exposition du fœtus. L'homogénéisation partielle des tissus de la mère a été validée sur le modèle de la femme enceinte japonaise. L'utilisation d'une morphologie synthétique pour la mère a été étudiée et bien que l'exposition du fœtus dans les deux cas ne soit pas strictement comparable, le comportement d'un point de vue global est bien similaire. L'objectif n'étant pas ici de créer un modèle à l'identique à la femme enceinte japo-

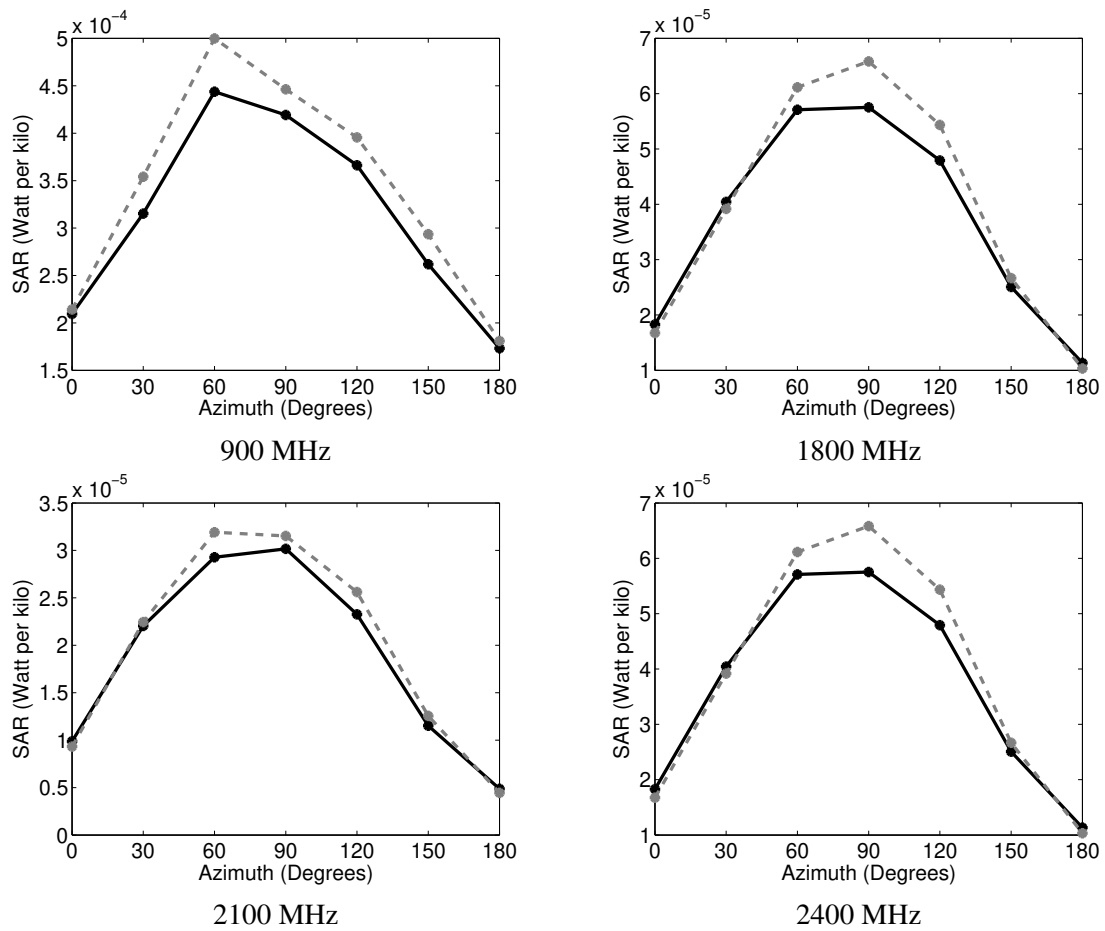


FIGURE 2.5 – DAS corps entier dans le fœtus en fonction de l'angle d'arrivée de l'onde incidente (pointillés et cercles gris : modèle hétérogène ; ligne et cercles noirs : modèle semi homogène).

naïve, mais de vérifier la cohérence des comportements, nous utiliserons dans la suite le modèle Victoria augmenté.

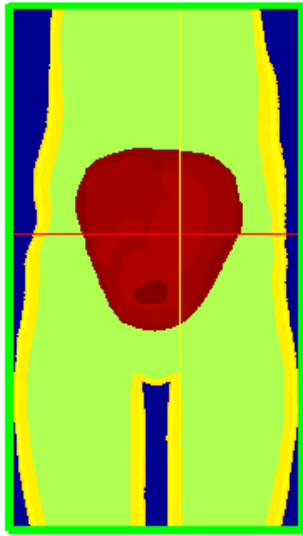


FIGURE 2.6 – Modèle synthétique augmenté élargi.

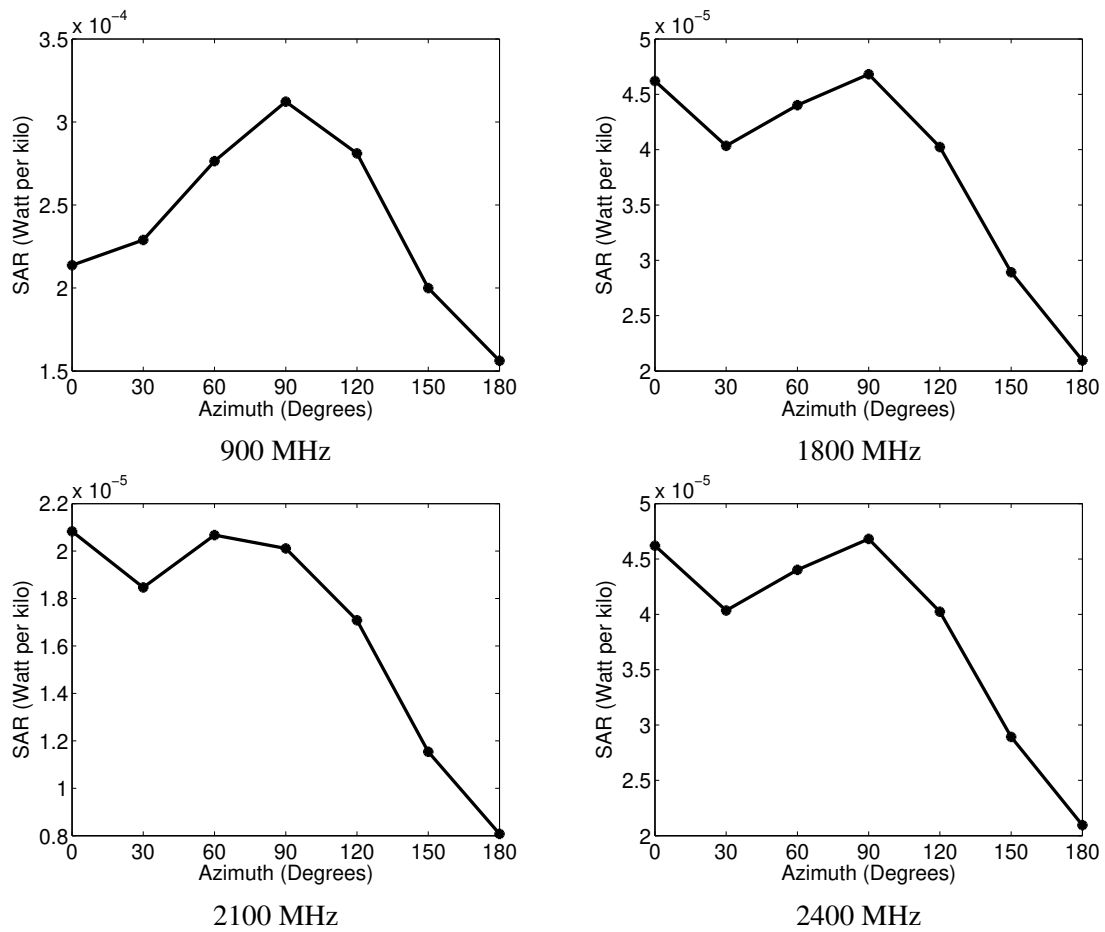


FIGURE 2.7 – DAS corps entier dans le fœtus en fonction des angles d’arrivée de l’onde incidente pour le modèle synthétique augmenté.

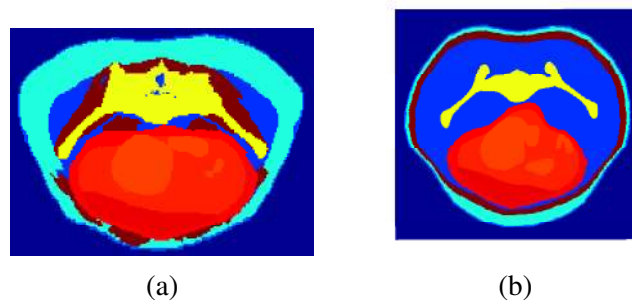


FIGURE 2.8 – (a) Modèle semi homogène (b) Modèle synthétique augmenté. La couche de graisse est en bleu cyan et celle de muscle en marron.

Chapitre 3

Processus gaussiens

Résumé

Ce chapitre constitue une introduction succincte sur les processus gaussiens. Dans un premier temps, nous reviendrons sur toutes les définitions de base et les théorèmes importants qui permettent de comprendre les propriétés de ces processus stochastiques. Puis, il sera question de l'utilisation en pratique des processus gaussiens pour modéliser un phénomène que l'on a observé un certain nombre de fois.

Comme nous l'avons dit précédemment, nous ne pourrons avoir accès qu'à un nombre limité de simulations de dosimétrie numérique, et il nous faudra donc avoir recours à un certain modèle pour pouvoir prédire les valeurs de DAS que nous n'aurons pas observées. Les modélisations possibles sont nombreuses, mais, étant donné le type de méthodes que nous allons vouloir mettre en place pour l'estimation d'un quantile du DAS (voir chapitre 4), et en l'absence de connaissances précises sur la forme du DAS, nous supposons que nos observations, que nous noterons (Y_1, Y_2, \dots) , sont des réalisations de variables aléatoires $(Y_s, s \in S)$, et que ces variables aléatoires sont corrélées. Le phénomène global sera donc modélisé par un processus stochastique (également appelé fonction aléatoire, mais ce terme est plus rarement employé et nous ne l'utiliserons qu'anecdotiquement ici ; on peut également parler de processus aléatoire).

En particulier, pour toutes les bonnes propriétés qu'il possède, nous faisons l'hypothèse que ce processus est gaussien. Dans cette partie, nous allons, dans un premier temps, mettre en place le cadre théorique des processus gaussiens. Dans un second temps, il sera question de la modélisation des processus gaussiens en pratique : comment calculer la loi du processus à partir d'observations, comment le choix de la fonction de covariance est déterminant pour le processus gaussien, comment simuler une trajectoire en pratique.

3.1 Processus stochastiques gaussiens

Dans cette partie, nous posons le cadre théorique de notre modélisation du DAS par la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien. Nous définissons les processus stochastiques, les espaces gaussiens, et leur propriétés ; nous ne considérerons ici que le cas réel. Pour les définitions dans les cas complexes et pour plus de détails, se reporter à [Neveu, 1968] et [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004].

Commençons donc par quelques définitions générales sur les processus stochastiques.

Définition 1. *Processus stochastique.* Soit $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé, avec \mathcal{A} une tribu et \mathbb{P} une probabilité sur (Ω, \mathcal{A}) , et soit (E, \mathcal{B}) un espace mesurable avec $E \subset \mathbb{R}$ et \mathcal{B} une tribu. Soit $(Y_s, s \in S)$ une famille de variables aléatoires (v.a.) définies sur (Ω, \mathcal{A}) et à valeurs dans (E, \mathcal{B}) . On dit que $(Y_s, s \in S)$ est un processus stochastique réel (également appelé fonction aléatoire réelle) d'espace de base $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ et d'espace d'états (E, \mathcal{B}) ; S est l'ensemble des temps.

Pour ω fixé dans Ω , $s \mapsto Y_s(\omega)$ est la trajectoire du point ω . Pour s fixé dans S , $\omega \mapsto Y_s(\omega)$ est l'état du processus à l'instant s .

La moyenne d'un processus stochastique $(Y_s, s \in S)$ est définie comme la fonction

$$m : \begin{cases} S \longrightarrow E \\ s \longmapsto \mathbb{E}(Y_s) \end{cases} ,$$

lorsque les v.a. Y_s ($s \in S$) sont intégrables. Un processus stochastique de moyenne nulle est dit centré et, pour tout processus stochastique $(Y_s, s \in S)$ possédant une moyenne, on appelle $(Y_s - m(s), s \in S)$ le processus stochastique centré associé au processus stochastique donné.

La covariance d'un processus stochastique $(Y_s, s \in S)$ de carré intégrable (également appelé processus stochastique du second ordre) est définie, lorsque ce processus est centré, comme la fonction

$$K : \begin{cases} S \times S \longrightarrow \mathbb{R} \\ (s, s') \longmapsto \mathbb{E}(Y_s Y_{s'}) \end{cases} .$$

La covariance d'un processus de carré intégrable non centré est définie comme la covariance de la famille centrée associée, soit $K(s, s') = \mathbb{E}([Y_s - m(s)][Y_{s'} - m(s')]) = \mathbb{E}(Y_s Y_{s'}) - m(s)m(s')$.

Intéressons nous à présent au cas particulier gaussien.

Définition 2. *Espace gaussien.* Un espace gaussien réel est un sous espace vectoriel fermé d'un espace $L^2_{\mathbb{R}}(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$, qui est composé de classes d'équivalences de variables aléatoires (v.a.) gaussiennes centrées.

Dans la suite, nous ne considèrerons que des v.a. gaussiennes centrées, car, comme nous l'avons vu précédemment, il est toujours possible de se ramener au cas centré en soustrayant la fonction moyenne. Dans la suite, lorsque nous parlerons d'espaces gaussiens, il faudra sous-entendre espaces gaussiens centrés.

Définition 3. *Processus gaussien.* Un processus stochastique est dit gaussien (centré) si toute combinaison linéaire des v.a. $(Y_s, s \in S)$ est gaussienne (centrée).

À tout processus gaussien (centré) associons le sous espace vectoriel fermé de $L^2_{\mathbb{R}}(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ engendré par les classes d'équivalences des v.a. $(Y_s, s \in S)$, que nous notons H . Cet espace, formé par les combinaisons linéaires des classes d'équivalences des Y_s et par leurs limites dans L^2 , est un espace gaussien. C'est l'espace gaussien associé au processus gaussien $(Y_s, s \in S)$. Les propriétés des processus gaussiens et des espaces gaussiens associés sont décrits dans [Neveu, 1968] et [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004].

Nous allons néanmoins développer la question des espaces fonctionnels hilbertiens à noyaux auto-reproduisants (appelés espaces de Aronszajn, que nous définirons dans la suite) en relation avec les processus stochastiques gaussiens. En effet, ces espaces jouent un rôle important dans la construction des processus gaussiens à partir de la donnée de leurs covariances et dans la régularité trajectorielle de ces processus stochastiques. Ces précisions nous apparaissent donc essentielles pour justifier notre modélisation.

Commençons par définir les noyaux réels hermitiens de type positif et leurs propriétés.

Définition 4. *Noyau hermitien de type positif.* Un noyau réel K sur S est une fonction K sur $S \times S$ à valeurs réelles. Il est dit hermitien s'il vérifie la relation de symétrie hermitienne

$$K(s, s') = K(s', s) \quad \forall s, s' \in S, \quad (3.1)$$

et de type positif si pour toute fonction a sur S de support fini et à valeurs réelles on a

$$\sum_{s \times s} a(s)a(s')K(s, s') \in \mathbb{R}_+ = [0, +\infty[. \quad (3.2)$$

Lemme 0.1. *La covariance d'un processus stochastique $(Y_s, s \in S)$ de carré intégrable est un noyau hermitien de type positif.*

Démonstration. Considérons le cas où le processus est centré, alors

$$K(s, s') = \mathbb{E}(Y_s Y_{s'}) = \mathbb{E}(Y_{s'} Y_s) = K(s', s) .$$

De plus, pour toute fonction a sur S de support fini et à valeurs réelles

$$\begin{aligned} \sum_{S \times S} a(s) a(s') K(s, s') &= \sum_{S \times S} a(s) a(s') \mathbb{E}(Y_s Y_{s'}) \\ &= \mathbb{E} \left(\left| \sum_S a(s) Y_s \right|^2 \right) \geq 0 . \end{aligned}$$

Une fonction de covariance vérifie donc bien les propriétés (3.1) et (3.2) de la Définition 4, ce qui conclut la preuve du Lemme 0.1. \square

Dans la suite, nous montrerons que, réciproquement, tout noyau hermitien de type positif est la covariance d'un processus stochastique gaussien centré.

À tout processus gaussien centré $(Y_s, s \in S)$ est associé un espace hilbertien \mathcal{H} sur S . Cet espace vectoriel \mathcal{H} est défini comme l'image de l'espace gaussien H associé au processus stochastique donné par l'application linéaire u de H dans l'espace des fonctions réelles sur S définie par

$$u(Z)[s] = \mathbb{E}[ZY_s] \quad \forall s \in S . \quad (3.3)$$

Comme l'application u est injective puisque $(Y_s, s \in S)$ engendre H , l'espace vectoriel \mathcal{H} peut être muni du produit scalaire

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \langle u^{-1}(f), u^{-1}(g) \rangle_H \quad \forall f, g \in \mathcal{H} ,$$

et devient ainsi un espace de Hilbert isomorphe à H par u .

En outre, de même que les Y_s ($s \in S$) engendrent H , les fonctions $K(s, \cdot) = u(Y_s)$ engendrent l'espace de Hilbert \mathcal{H} lorsque s parcourt S . Notons que $K(s, s')$ est la covariance du processus gaussien, car $u(Y_s)[s'] = K(s, s') = \mathbb{E}[Y_{s'} Y_s]$.

Nous abordons enfin la notion d'auto-reproduction, qui est fondamentale pour la construction des espaces hilbertiens en relation avec les espaces gaussiens. Pour toute fonction h de \mathcal{H} , par définition de l'application u donnée dans (3.3) et en posant $Z = u^{-1}(h)$, on a

$$\begin{aligned} \langle h, K(s, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}} &= \langle u^{-1}(h), u^{-1}(u(Y_s)) \rangle_H \\ &= \langle Z, Y_s \rangle_H \\ &= \mathbb{E}(ZY_s) \\ &= u(Z)[s] \\ &= u(u^{-1}(h))[s] \\ &= h(s) , \end{aligned}$$

si s appartient à S .

En particulier, pour $h = K(s', \cdot) \in \mathcal{H}$, il vient

$$\langle K(s', \cdot), K(s, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}} = K(s', s), \quad (3.4)$$

ce qui signifie que le noyau K vérifie la propriété d'auto-reproduction dans \mathcal{H} (qui est, rappelons-le, l'espace hilbertien engendré par les fonctions $K(s, \cdot) = u(Y_s)$, image de l'espace gaussien H associé au processus gaussien $(Y_s, s \in S)$ par l'application bijective u). On a ainsi établi la proposition suivante.

Théorème 1 (Théorème de Moore-Aronszajn). *Soit $(Y_s, s \in S)$ un processus stochastique gaussien centré et de fonction de covariance K . Il existe alors un espace hilbertien $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ de fonctions sur S à valeurs réelles et vérifiant les propriétés suivantes :*

- a) *les fonctions $K(s, \cdot)$ ($s \in S$) appartiennent à \mathcal{H} et engendrent cet espace lorsque s parcourt S ,*
- b) *la valeur au point $s \in S$ de toute fonction $h \in \mathcal{H}$ est donnée par le produit scalaire $h(s) = \langle h, K(s, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}}$.*

En outre l'espace gaussien H associé au processus stochastique gaussien $(Y_s, s \in S)$ est isomorphe à l'espace hilbertien \mathcal{H} par l'application $Z \mapsto \mathbb{E}(ZY)$. L'espace \mathcal{H} ainsi construit est appelé espace auto-reproduisant associé au processus gaussien centré $(Y_s, s \in S)$.

Les propriétés a) et b) de la Proposition 1 caractérisent entièrement l'espace hilbertien \mathcal{H} à l'aide de la covariance K du processus gaussien $(Y_s, s \in S)$. Inversement, la proposition suivante permet de construire un espace \mathcal{H} vérifiant les propriétés a) et b) de la Proposition 1 à partir de tout noyau hermitien de type positif ; ce résultat apparaîtra comme l'étape essentielle de la construction d'un processus gaussien de covariance donnée.

Proposition 1.1. *Pour tout ensemble S et tout noyau hermitien de type positif K sur S , il existe un espace hilbertien unique formé de fonctions sur S tel que*

- a) *les fonctions $K(s, \cdot)$ ($s \in S$) appartiennent à \mathcal{H} et engendrent cet espace lorsque s parcourt S ,*
- b) *la valeur au point $s \in S$ de toute fonction $h \in \mathcal{H}$ est donnée par le produit scalaire $h(s) = \langle h, K(s, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}}$.*

Cet espace, que l'on notera $\mathcal{H}((S, K))$, est appelé espace auto-reproduisant de noyau K .

Démonstration. Voir [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004, pages 20-22]. □

Proposition 1.2. *Pour tout ensemble S et tout noyau hermitien de type positif K sur S , il existe un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ et un processus stochastique gaussien centré de covariance K défini sur cet espace.*

Démonstration. Construisons, pour tout ensemble J , un processus gaussien centré $(X_i, i \in J)$, de covariance $(I(i, j) ; i, j \in J)$, c'est-à-dire une famille indépendante indexée par J de variables aléatoires gaussiennes réduites. Il suffit de prendre pour processus gaussien celui formé par les coordonnées de l'espace de probabilité

$$(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) = \left[\mathbb{R}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) dx \right]^J .$$

L'espace gaussien H associé à ce processus gaussien se compose des séries $\sum_J a_i X_i$ pour lesquelles $\sum_J |a_i|^2 < \infty$.

Soit alors K un noyau hermitien de type positif sur S et soit \mathcal{H} l'espace auto-reproduisant qui lui est associé. Soit $(h_i, i \in J)$ une base orthonormale de \mathcal{H} ; construisons comme ci-dessus un processus gaussien $(X_i, i \in J)$ indexée par J et de covariance I sur $J \times J$. Considérons ensuite l'isomorphisme de \mathcal{H} sur l'espace gaussien engendré par $(X_i, i \in J)$ qui applique h_i sur X_i pour tout $i \in J$ et désignons pour tout $s \in S$ par Y_s l'image dans H de $K(s, \cdot) \in \mathcal{H}$; alors $(Y_s, s \in S)$ est un processus gaussien centré puisque toute combinaison linéaire des Y_s appartient à H , et l'espace gaussien H coïncide avec l'espace gaussien associé à $(Y_s, s \in S)$ puisque les Y_s ($s \in S$) engendrent H de même que les $K(s, \cdot)$ ($s \in S$) engendrent \mathcal{H} . Enfin

$$\mathbb{E}[Y_s Y_t] = \langle K(s, \cdot), K(t, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}} = K(s, t) ,$$

pour tout couple $(s, t) \in S \times S$. □

Corollaire 1.1. *Corollaire de la Proposition 1.2. Pour tout ensemble S , toute fonction m sur S et tout noyau hermitien de type positif K sur S , il existe un processus gaussien $(Y_s, s \in S)$ indexé par S , de moyenne m et de covariance K .*

Démonstration. On obtient ce processus gaussien en ajoutant la fonction (non aléatoire) m au processus gaussien centré de covariance K construit dans la Proposition 1.2. □

Venons-en maintenant aux propriétés de continuité dans l'espace des fonctions de carré intégrable L^2 d'un processus gaussien centré en relation avec la covariance et l'espace auto-reproduisant qui lui sont associés.

Proposition 1.3. *Pour qu'un processus gaussien centré $(Y_s, s \in S)$ indexé par un espace topologique S soit continu dans L^2 , il est nécessaire et suffisant que sa covariance K soit continue sur $S \times S$. Sous cette condition l'espace auto-reproduisant $\mathcal{H}(S, K)$ est formé de fonctions continues sur S ; il est séparable dès que l'espace topologique S l'est.*

Pour qu'un processus gaussien centré $(Y_s, s \in S)$ soit borné dans L^2 , il faut et il suffit que sa covariance soit bornée. Sous cette condition, il existe une constante C telle que $\sup_{s \in S} |h(s)| \leq C \|h\|_{\mathcal{H}}$ pour tout h de \mathcal{H} .

Démonstration. De l'égalité

$$\mathbb{E}(|Y_t - Y_s|^2) = K(t, t) - 2K(t, s) + K(s, s) , s, t \in S ,$$

on déduit que $\lim_{t \rightarrow s} Y_t = Y_s$ dans L^2 dès que la fonction K est continue sur $S \times S$ au point (s, s) ; la continuité de K sur $S \times S$ en tout point de la diagonale entraîne donc déjà la continuité de l'application $s \mapsto Y_s$ de S dans L^2 . Inversement la continuité de cette application implique celle de la fonction K sur $S \times S$ en vertu de

$$\begin{aligned} |K(s, t) - K(u, v)| &= |\mathbb{E}(Y_s Y_t - Y_u Y_v)| \\ &\leq |\mathbb{E}[(Y_s - Y_u)(Y_t - Y_v)]| + |\mathbb{E}[Y_u(Y_t - Y_v)]| + |\mathbb{E}[(Y_s - Y_u)Y_v]| \\ &\leq \|Y_s - Y_u\| \|Y_t - Y_v\| + \|Y_u\| \|Y_t - Y_v\| + \|Y_s - Y_u\| \|Y_v\| \\ &\rightarrow 0 \text{ lorsque } s \rightarrow u \text{ et } t \rightarrow v, \end{aligned}$$

la deuxième inégalité étant obtenue en appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz.

La continuité de l'application $s \mapsto Y_s$ de S dans L^2 qui équivaut à celle de l'application $s \mapsto K(s, \cdot)$ de S dans \mathcal{H} qui lui correspond dans l'isomorphisme de H avec \mathcal{H} , entraîne que, pour tout $h \in \mathcal{H}$, la fonction $h(s) = \langle h, K(s, \cdot) \rangle$ de s est continue. En outre, si S possède une suite dense, soit $(s_n, n \in \mathbb{N})$, la famille $(K(s_n, \cdot), n \in \mathbb{N})$ engendre encore \mathcal{H} en vertu de la continuité de $s \mapsto K(s, \cdot)$ et l'espace hilbertien \mathcal{H} est alors séparable.

De l'égalité $\mathbb{E}(|Y_s|^2) = K(s, s)$ pour tout s dans S , on en déduit que le processus gaussien $(Y_s, s \in S)$ est borné dans L^2 dès que la fonction K est bornée sur la diagonale de $S \times S$. Inversement, l'inégalité de Cauchy-Schwarz $|K(s, t)| = |\mathbb{E}[Y_s Y_t]| \leq \|Y_s\| \|Y_t\|$, avec $s, t \in S$, montre que la fonction K est bornée sur $S \times S$ dès que l'application $s \mapsto Y_s$ est bornée dans L^2 . Enfin, pour toute fonction $h \in \mathcal{H}$, on a pour tout $s \in S$

$$|h(s)| = |\langle h, K(s, \cdot) \rangle| \leq \|h\| K(s, s)^{\frac{1}{2}}.$$

On en conclut que $\sup_S |h| \leq C \|h\|$ en posant $C^2 = \sup_S K(s, s)$. □

La proposition suivante traite des développements orthogonaux d'un processus gaussien et de sa covariance. Ces propriétés justifieront la façon de simuler en pratique la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien que nous détaillerons dans la Partie 3.2.

Théorème 2 (Théorème de Mercer.). *Soit $(Y_s, s \in S)$ un processus gaussien centré de covariance K , d'espace gaussien associé H et d'espace auto-reproduisant associé \mathcal{H} . Soit $(\xi_n, n \in \mathbb{N})$ une base orthonormale de l'espace gaussien H et soit $(h_n, n \in \mathbb{N})$ la base orthonormale de \mathcal{H} correspondante. Pour tout s dans S , on a alors*

$$Y_s = \sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(s) \xi_n, \quad K(s, \cdot) = \sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(s) h_n(\cdot),$$

les séries des seconds membres convergeant dans les espaces hilbertiens H et \mathcal{H} .

Pour tout couple (s, s') de $S \times S$, on a

$$K(s, s') = \sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(s) h_n(s').$$

En outre lorsque S est un espace topologique et lorsque la covariance K est continue sur $S \times S$, la série précédente est uniformément convergente sur $U \times U$ pour tout compact U de S .

Démonstration. Les coefficients des développements orthogonaux de Y_s et de $K(s, \cdot)$ suivant respectivement les bases orthonormales $(\xi_n, n \in \mathbb{N})$ et $(h_n, n \in \mathbb{N})$ valent

$$\langle Y_s, \xi_n \rangle_{\mathbb{H}} = \langle K(s, \cdot), h_n \rangle_{\mathcal{H}} = h_n(s), \quad s \in S, \quad n \in \mathbb{N}.$$

La première proposition s'en déduit immédiatement. En prenant les produits scalaires dans \mathcal{H} de $K(s, \cdot)$ avec les deux membres de l'égalité, $K(s, \cdot) = \sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(s) h_n$, on obtient que $K(s, t) = \sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(s) h_n(t)$ pour tout couple $(s, t) \in S \times S$ et en particulier que $K(s, s) = \sum_{n \in \mathbb{N}} |h_n(s)|^2$ pour tout $s \in S$.

La continuité de la covariance K entraîne que les fonctions de \mathcal{H} sont continues sur S . Alors la convergence monotone lorsque $p \rightarrow \infty$ des fonctions continues $\sum_{n \leq p} |h_n(s)|^2$ vers la fonction continue $K(s, s)$ que l'on vient d'établir a nécessairement lieu uniformément sur tout compact U de S en vertu du lemme de Dini : pour tout $\epsilon > 0$ fixé les ensembles compacts de U définis par $\{u : u \in U, K(u, u) \geq \epsilon + \sum_{n \leq p} |h_n(u)|^2\}$ décroissent vers \emptyset lorsque $p \rightarrow \infty$; l'un d'eux est donc vide. Cela montre que la série $\sum_{n \in \mathbb{N}} h_n(u) h_n$ converge dans \mathcal{H} uniformément en u sur le compact U , ce qui s'écrit

$$\sup_U \|K(u, \cdot) - \sum_{n \leq p} h_n(u) h_n\| \rightarrow 0, \quad p \rightarrow \infty.$$

Comme la restriction à U de la fonction continue $s \mapsto K(s, \cdot)$ est bornée puisque U est compact, on voit alors que

$$\begin{aligned} & \sup_{U \times U} |K(u, s) - \sum_{n \leq p} h_n(u) h_n(s)| \\ & \leq \sup_U \|K(u, \cdot) - \sum_{n \leq p} h_n(u) h_n\| \times \sup_U \|K(s, \cdot)\| \\ & \rightarrow 0 \text{ lorsque } p \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve de la Proposition 2. □

Proposition 2.1. *Soit $(Y_s, s \in S)$ un processus gaussien centré dont le paramètre varie dans un espace mesurable (S, \mathcal{S}) et dont la covariance est mesurable et bornée. Pour toute mesure bornée ν sur S il existe alors un élément unique de l'espace gaussien associé au processus gaussien $(Y_s, s \in S)$, soit $\int \nu(ds) Y_s$, tel que l'on ait*

$$\mathbb{E} \left[\int_S \nu(ds) Y_s \cdot Z \right] = \int_S \nu(ds) \mathbb{E}[Y_s Z],$$

pour tout Z dans \mathbb{H} et plus généralement pour tout Z dans $L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Si le processus gaussien $(Y_s, s \in S)$ possède une version mesurable notée \tilde{Y} , presque toute la trajectoire $\tilde{Y}(\cdot, \omega)$ est intégrable sur (S, \mathcal{S}, ν) et la v.a. définie presque partout (p.p.) par l'intégrale $\int_S \nu(ds) \tilde{Y}(s)$ appartient à la classe d'équivalence de $\int \nu(ds) Y_s$.

D'autre part la fonction $\int \nu(ds) K(s, \cdot)$ appartient à \mathcal{H} et est l'image de $\int \nu(ds) Y_s$ dans l'isomorphisme de \mathbb{H} et \mathcal{H} . Pour tout h dans \mathcal{H} on a

$$\langle \int \nu(ds) K(s, \cdot), h \rangle_{\mathcal{H}} = \int \nu(ds) h(s).$$

Le sous espace vectoriel de H formé par les éléments qui peuvent s'écrire sous la forme $\int \nu(ds)Y_s$ (où ν est une mesure bornée sur S) est dense dans H puisqu'il contient déjà toutes les combinaisons linéaires des Y_s ($s \in S$). Néanmoins lorsque H est de dimension infinie, ce sous espace vectoriel ne coïncide avec H que dans des cas très particuliers.

Démonstration. L'application $s \mapsto Y_s$ de S dans H est bornée et faiblement mesurable au sens où $\mathbb{E}(Y.Z)$ est une fonction mesurable pour tout $Z \in H$. En effet, la mesurabilité de $\mathbb{E}(Y.Z)$ résulte de ce que Z peut s'écrire comme la limite dans H d'une suite de combinaisons linéaires des Y_s ($s \in S$) et de ce que $\mathbb{E}(Y.Y_t) = K(., t)$ est mesurable pour tout $t \in S$ par hypothèse. L'intégrale $\int \nu(ds)\mathbb{E}(Y_s Z)$ a donc un sens pour tout $Z \in H$ et elle définit une forme anti-linéaire (une application qui vérifie $f(ix) = -if(x)$) sur H , de norme majorée par $\int_S |\nu(ds)| \sup_S \|Y_s\|$. Il en résulte l'existence d'un élément de H , soit $\int \nu(ds)Y_s$, vérifiant la formule de la proposition pour tout $Z \in H$; cet élément est appelé l'intégrale faible de $(Y_s, s \in S)$ dans H par rapport à la mesure ν . On voit que la formule de la proposition reste valable pour tout $Z \in L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ en projetant Z sur H .

Par isomorphie, l'application $s \mapsto K(s, .)$ de S dans \mathcal{H} est faiblement mesurable et bornée, et possède donc une intégrale faible qui est l'unique élément de \mathcal{H} , soit h_ν , tel que $\langle h_\nu, h \rangle_{\mathcal{H}} = \int \nu(ds) \langle K(s, .), h \rangle$ pour tout $h \in \mathcal{H}$. Alors $h_\nu(t) = \langle h_\nu, K(t, .) \rangle = \int \nu(ds)K(s, t)$ pour tout $t \in S$ et la fonction h_ν de \mathcal{H} coïncide donc avec la fonction $\int \nu(ds)K(s, .)$. Par construction cette fonction correspond à $\int \nu(ds)Y_s$ dans l'isomorphie de H avec \mathcal{H} .

D'autre part si \tilde{Y} est une version mesurable du processus $(Y_s, s \in S)$, le théorème de Fubini implique que presque toute trajectoire $\tilde{Y}(., \omega)$ est de carré intégrable par rapport à $|\nu|$, puisqu'il permet d'écrire que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d\mathbb{P}(\omega) \int_S |\nu(ds)| |\tilde{Y}(s, \omega)|^2 &= \int_S |\nu(ds)| \int_{\Omega} d\mathbb{P}(\omega) |\tilde{Y}(s, \omega)|^2 \\ &\leq \int_S |\nu(ds)| \times \sup_S \|Y_s\|^2 . \end{aligned}$$

Alors $\tilde{Y}(s, \omega)$ est intégrable pour presque tout ω et la variable aléatoire définie presque partout par l'intégrale $\int_S \nu(ds)\tilde{Y}(s, \omega)$ est de carré intégrable en vertu de l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\int_{\Omega} d\mathbb{P}(\omega) \left| \int_S \nu(ds)\tilde{Y}(s, \omega) \right|^2 \leq \int_{\Omega} d\mathbb{P}(\omega) \int_S |\nu(ds)| |\tilde{Y}(s, \omega)|^2 , \quad \int_S |\nu(ds)| < \infty .$$

En outre, une nouvelle application du théorème de Fubini montre que pour tout $Z \in L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ on a :

$$\int_{\omega} \int_S \nu(ds)\tilde{Y}(s, \omega)Z(\omega)d\mathbb{P}(\omega) = \int_S \nu(ds)\mathbb{E}[\tilde{Y}(s, .)Z] ,$$

ce qui permet de conclure que la variable aléatoire $\int_S \nu(ds)\tilde{Y}(s, .)$ appartient à la classe d'équivalence de $\int_S \nu(ds)Y_s$. \square

Proposition 2.2. Soit K un noyau hermitien de type positif défini et continu sur un espace compact S . Pour toute mesure (de Radon) finie positive μ sur S de support S , il existe une base ortho-normale $(h_n, n \in \mathbb{N})$ de l'espace $L^2(S, \mu)$ formée de fonctions propres de l'opérateur K_μ défini sur $L^2(S, \mu)$ par

$$K_\mu f = \int_S K(s, .)f(s)\mu(ds) .$$

Les valeurs propres λ_n ($n \in \mathbb{N}$) correspondantes sont positives et telles que $\sum_{\mathbb{N}} \lambda_n < \infty$. La famille dénombrable $\{\sqrt{\lambda_n}h_n, n \in \mathbb{N}_0\}$ où $\mathbb{N}_0 = \{n : \lambda_n \neq 0\}$, est alors une base orthonormale de l'espace auto-reproduisant $\mathcal{H}(S, K)$

Démonstration. L'opérateur K_μ sur $L^2(S, \mu)$ est un opérateur de Hilbert-Schmidt puisque l'intégrale $\int \int |K(s, t)|^2 d\mu(s) d\mu(t)$ est finie ; il est en outre hermitien et de type positif sur $L^2(S, \mu)$.

Quel que soit $f \in L^2(\mu)$, la mesure $f \cdot \mu$ est bornée sur S ; la fonction $K_\mu f = \int_S K(s, \cdot) f(s) \mu(ds)$ appartient donc à l'espace \mathcal{H} et vérifie l'égalité $\langle K_\mu f, h \rangle_{\mathcal{H}} = \int f(s) h(s) \mu(ds)$ pour tout $h \in \mathcal{H}$ d'après la proposition 2.1. Il s'en suit en particulier que $\lambda_n h_n = K_\mu h_n$ appartient à \mathcal{H} pour tout $n \in \mathbb{N}$, et donc que h_n appartient à \mathcal{H} si $n \in \mathbb{N}_0$ et que

$$\langle \lambda_n h_n, h \rangle_{\mathcal{H}} = \int h_n(s) h(s) \mu(ds)$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $h \in \mathcal{H}$. On en déduit que toute fonction $h \in \mathcal{H}$ orthogonale aux h_n ($n \in \mathbb{N}_0$) est nulle, ce qui établit que la suite précédente est une base de \mathcal{H} ; en effet, une telle fonction est continue sur S , donc appartient à $L^2(S, \mu)$, et est orthogonale dans $L^2(\mu)$ à tous les h_n ($n \in \mathbb{N}$) d'après la formule précédente. Cette fonction continue est donc nulle dans $L^2(S, \mu)$, ce qui n'est possible que si elle est nulle sur S puisque le support de μ est tout l'espace.

Enfin, puisque $\{\sqrt{\lambda_n}h_n, n \in \mathbb{N}_0\}$ est une base orthonormale de \mathcal{H} , on a $K(s, s) = \sum_{\mathbb{N}_0} \lambda_n |h_n(s)|^2$ d'après la proposition 2, et puisque les h_n sont orthogonaux dans $L^2(\mu)$, on a :

$$\sum_{\mathbb{N}} \lambda_n = \sum_{\mathbb{N}_0} \lambda_n = \int_S K(s, s) \mu(ds) < \infty .$$

□

Bien sûr, nous pourrions citer encore d'autres propriétés des processus gaussiens, mais celles que nous avons énoncées ici suffisent pour l'usage que nous en ferons. Par exemple, le théorème de Mercer (Proposition 2) montre que la fonction noyau K , structure de covariance du processus gaussien, peut s'écrire comme un produit scalaire, et permet ainsi de justifier le fait qu'en pratique, comme nous le ferons dans la suite, le produit scalaire dans un espace de grande dimension est remplacé par une fonction noyau (méthode connue sous le nom de "Kernel trick").

Il est temps à présent de décrire la modélisation qui consiste à considérer les observations que nous ferons du DAS comme des réalisations d'un processus gaussien.

3.2 Modélisation par des processus gaussiens en pratique

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 2, les données que nous allons traiter sont issues d'un code de calcul numérique, que nous allons considérer comme une fonction boîte-noire, à laquelle nous n'avons pas accès et que nous allons devoir estimer. En notant x les variables d'entrées (paramètres du modèle, tels que l'azimut et l'élévation du rayon incident,) et y la sortie du code (la valeur du DAS dans notre cas), le modèle s'écrit

$$y = f(x) , \quad (3.5)$$

où x appartient à \mathbb{R}^d (d est donc la dimension de l'espace des entrées) et f est une fonction à valeurs réelles.

Pour proposer un estimateur de f , nous allons faire l'hypothèse que f est la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien. Nous expliquons dans cette partie les aspects pratiques de cette modélisation, comme les formules de mise à jour de la moyenne et de la covariance (qui définissent la loi a posteriori du processus) lorsque des observations ont été faites, le choix de fonctions de covariances adaptées à notre problème, ou encore la simulation d'une trajectoire de processus gaussien en pratique, ce qui nous sera utile pour nos exemples sur des données synthétiques des chapitres 4 et 5.

La modélisation par des processus gaussiens a déjà été utilisée dans plusieurs contextes (voir par exemple [Forrester et al., 2008], [Gramacy and Lee, 2009], et les références associées). Elle vient du krigeage, une technique proposée par [Krige, 1951] dans son mémoire de master, et développée ensuite par [Matheron, 1971] pour être appliquée en géostatistique. Le krigeage consiste à interpoler des données spatiales en utilisant un prédicteur linéaire, en supposant que les erreurs ne sont pas indépendantes et peuvent être modélisées par un processus gaussien. [Sacks et al., 1989] ont utilisé cette modélisation pour des expériences simulées, et cette méthode s'est par la suite étendue à d'autres domaines, plus connus sous leur dénomination anglophone : *experimental design, sequential design, active learning, Bayesian optimisation*. Nous en dirons plus sur l'optimisation bayésienne au cours du chapitre 4, lorsque nous introduirons nos méthodes pour l'estimation d'un quantile ; pour le moment considérons uniquement le simple a priori de processus gaussien sur la fonction f , inconnue, que l'on cherche à estimer.

Nous allons considérer f comme la réalisation d'un processus gaussien de moyenne nulle et de fonction de covariance k , qui sera noté $GP(0, k(\cdot, \cdot))$. L'avantage de cette approche vient du fait que, conditionnellement aux observations $\mathbf{y}_t = (y_1, \dots, y_t)'$, où $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, la distribution a posteriori est toujours un processus gaussien, de moyenne $\mu_t(u)$ et de covariance $k_t(u, v)$ telles que :

$$\mu_t(u) = \mathbf{k}_t(u)' \mathbf{K}_t^{-1} \mathbf{y}_t , \quad (3.6)$$

$$k_t(u, v) = k(u, v) - \mathbf{k}_t(u)' \mathbf{K}_t^{-1} \mathbf{k}_t(v) , \quad (3.7)$$

où $\mathbf{k}_t(u) = [k(x_1, u) \dots k(x_t, u)]'$, ' désigne la transposition matricielle, u et v appartiennent à \mathcal{A} et $\mathbf{K}_t = [k(x_i, x_j)]_{1 \leq i, j \leq t}$, où les x_i sont dans \mathcal{A} , \mathcal{A} étant un ensemble compact de \mathbb{R}^d ; voir [Rasmussen and Williams, 2006] et [Srinivas et al., 2012] pour plus de détails.

Dans ce cadre de métamodèle gaussien, où l'on fait l'hypothèse que la fonction f est la réalisation d'une trajectoire d'un processus gaussien, la méthode classique consiste à prendre μ_t comme estimateur de f lorsque t points y_1, \dots, y_t avec $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, ont été observés. L'algorithme 1 résume la façon d'évaluer $\mu_t(\cdot)$ et $k_t(\cdot, \cdot)$ en pratique (voir [Rasmussen and Williams, 2006, Chapitre 2]).

Algorithme 1 Moyenne et variance du processus gaussien

Entrée : les observations $\mathbf{y}_t = (y_1, \dots, y_t)'$, où $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, σ^2 un bruit (“nugget”), u dans \mathcal{A}

- Évaluer \mathbf{K}_t et $\mathbf{k}_t(u)$ en utilisant (3.7)
 - Utiliser la factorisation de Cholesky pour calculer la matrice triangulaire inférieure L telle que $LL' = \mathbf{K}_t + \sigma^2 I_t$
 - L'estimation de $\mu_t(u)$ est donnée par $\mathbf{k}_t(u)(L' \setminus (L \setminus \mathbf{y}_t))$
 - Évaluer $\mathbf{v} = L \setminus \mathbf{k}_t(u)$
 - L'estimation de $k_t(u, u)$ est donnée par $k(u, u) - \mathbf{v}'\mathbf{v}$
-

Dans l'algorithme 1, on utilise la décomposition de Cholesky pour calculer l'inverse de la matrice de covariance \mathbf{K}_t . Le bruit $\sigma^2 I_t$ que l'on ajoute à la matrice \mathbf{K}_t sert à éviter les problèmes numériques : ajouter une valeur très faible (en pratique inférieure à 10^{-10}) sur la diagonale garantit que la matrice sera inversible.

3.2.1 Fonctions de covariance

La fonction de covariance caractérise le processus gaussien car elle porte les hypothèses de régularité sur la fonction que l'on cherche à estimer. Ici f modélise le DAS, une quantité physique supposée régulière ; ainsi, pour nos applications, nous allons considérer trois fonctions de covariance couramment utilisées dans des cas tels que celui-ci.

La première fonction de covariance que nous allons utiliser est le noyau gaussien, que nous noterons k_{SE} (pour “*Squared Exponential*”)

$$k_{\text{SE}}(u, v) = \exp\left(-\frac{\|u - v\|^2}{2\ell^2}\right), u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d, \ell > 0, \quad (3.8)$$

où $\|u\|$ désigne la norme euclidienne de u dans \mathbb{R}^d , et ℓ est un hyperparamètre (un paramètre de la loi a priori) qui définit la longueur de corrélation. De façon imagée, on peut dire que ℓ est la distance à partir de laquelle (sur une dimension donnée) les variables d'entrée ne sont plus corrélées. La définition (3.8) sera utilisée si l'on pense que le processus varie de la même façon dans toutes les directions ; dans le cas contraire, on s'en remettra à la version anisotrope de ce

noyau qui permet de généraliser l'expression de la covariance gaussienne :

$$k_{\text{SE}}(u, v) = \exp\left(-\frac{1}{2}(u - v)'M^{-1}(u - v)\right), u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d, \quad (3.9)$$

$$M = \begin{pmatrix} \ell_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ell_2^2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \ell_d^2 \end{pmatrix}, \ell_1, \ell_2, \dots, \ell_d > 0. \quad (3.10)$$

D'après [Rasmussen and Williams, 2006, Chapitre 4], comme cette fonction de covariance est infiniment différentiable, une trajectoire de processus gaussien avec cette fonction de covariance est continue et infiniment différentiable en moyenne quadratique, ce qui se traduit par une trajectoire très "lisse". Notons cependant que, dans le cas d'une fonction de covariance stationnaire (comme, en l'occurrence, le noyau gaussien), les propriétés du noyau en 0 suffisent à déduire les propriétés de continuité et de différentiabilité du processus gaussien (voir [Stein, 1999, Section 2.4] et [Rasmussen and Williams, 2006, Section 4.1.1]).

On peut voir des exemples de trajectoires de processus gaussien pour cette covariance en dimension 1 et 2 dans la figure 3.1.

Selon [Stein, 1999], une hypothèse de régularité aussi forte ne peut pas être réaliste pour modéliser de nombreux phénomènes physiques ; nous allons donc considérer deux autres fonctions de covariance qui appartiennent à la classe de fonctions de covariance de Matérn, dont la définition générale est la suivante :

$$k_{\text{Matérn}}(u, v) = \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}\|u - v\|}{\ell}\right)^\nu K_\nu\left(\frac{\sqrt{2\nu}\|u - v\|}{\ell}\right), u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d, \ell > 0, \nu > 0, \quad (3.11)$$

où K_ν est une fonction de Bessel modifiée d'ordre ν , voir [Abramowitz and Stegun, 1965, Section 9.6] pour plus de détails. Néanmoins, pour modéliser un phénomène physique, [Rasmussen and Williams, 2006] recommandent de considérer les cas $\nu = 3/2$ et $\nu = 5/2$, pour lesquels l'expression de $k_{\text{Matérn}}$ est largement simplifiée. Ainsi, pour $\nu = p + \frac{1}{2}$, où p appartient à \mathbb{N} ,

$$\begin{aligned} & k_{\text{Matérn}, \nu=p+\frac{1}{2}}(u, v) \\ &= \exp\left(-\frac{\sqrt{2\nu}\|u - v\|}{\ell}\right) \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(2p+1)} \sum_{i=0}^p \frac{(p+i)!}{i!(p-i)!} \left(\frac{\sqrt{8\nu}\|u - v\|}{\ell}\right)^{p-i}, u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d, \ell > 0, \end{aligned} \quad (3.12)$$

voir [Abramowitz and Stegun, 1965, Equation 10.2.15] pour plus de détails. Nous pouvons donner dans la figure 3.2 des exemples de réalisation de trajectoires de processus gaussien de moyenne nulle avec les noyaux $k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{3}{2}}$ et $k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{5}{2}}$, mais également pour $k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{1}{2}}$ qui nous sera utile

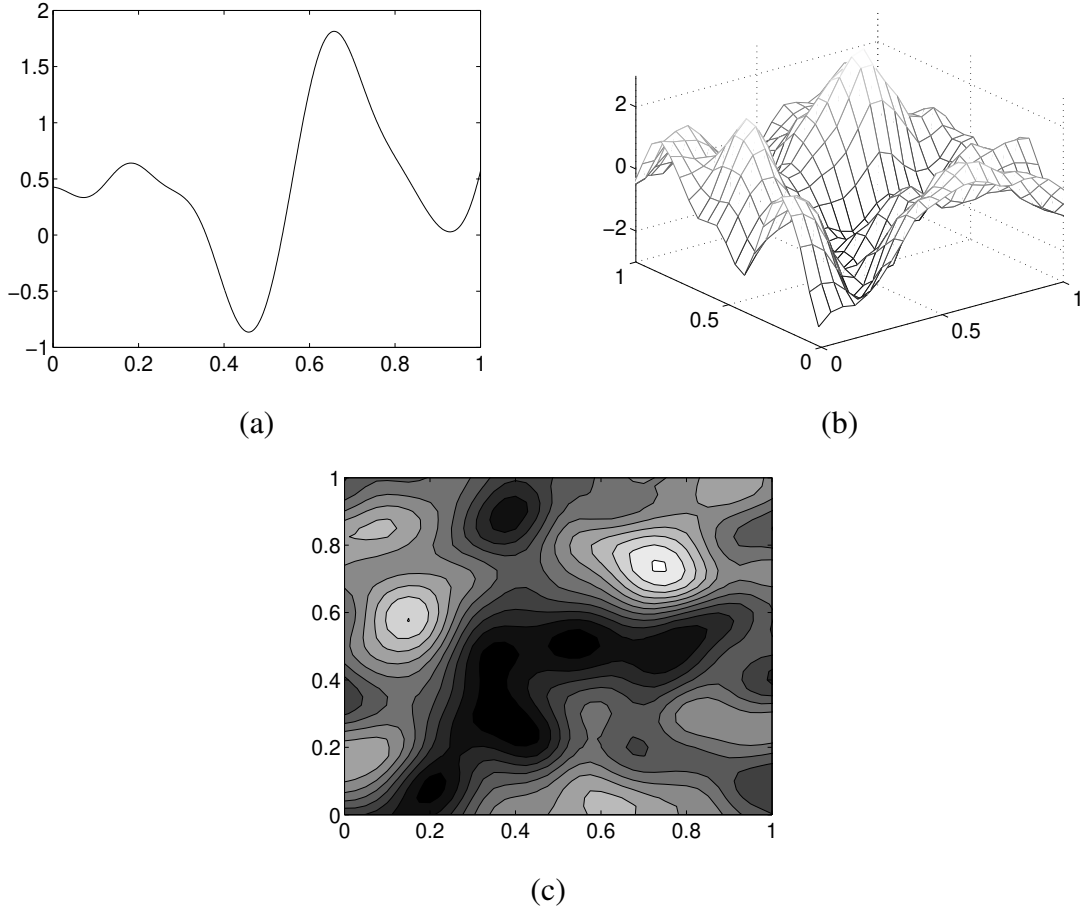


FIGURE 3.1 – (a) et (b) : réalisations de trajectoires de processus gaussiens avec une structure de covariance gaussienne (3.8), pour $\ell = 0.1$, $d = 1$ et $d = 2$; (c) : graphe des contours de (b).

pour les applications numériques du chapitre 5. Les formules explicites pour ces noyaux sont :

$$k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{1}{2}}(u, v) = \exp\left(-\frac{\|u - v\|}{\ell}\right), \quad (3.13)$$

$$k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{3}{2}}(u, v) = \left(1 + \frac{\sqrt{3}\|u - v\|}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3}\|u - v\|}{\ell}\right), \quad (3.14)$$

$$k_{\text{Matérn}, \nu=\frac{5}{2}}(u, v) = \left(1 + \frac{\sqrt{5}\|u - v\|}{\ell} + \frac{5\|u - v\|^2}{3\ell^2}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5}\|u - v\|}{\ell}\right), \quad (3.15)$$

avec $u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d$ et $\ell > 0$. Plus ν est grand, plus la trajectoire du processus gaussien est lisse. Ainsi, lorsque $\nu \rightarrow \infty$, on retrouve le noyau gaussien défini dans (3.9).

Notons qu'il est également possible de définir une version anisotrope des noyaux de Matérn en remplaçant dans (3.11), (3.12), (3.13), (3.14) et (3.15)

$$\frac{\|u - v\|}{\ell}, u, v \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d, \ell > 0,$$

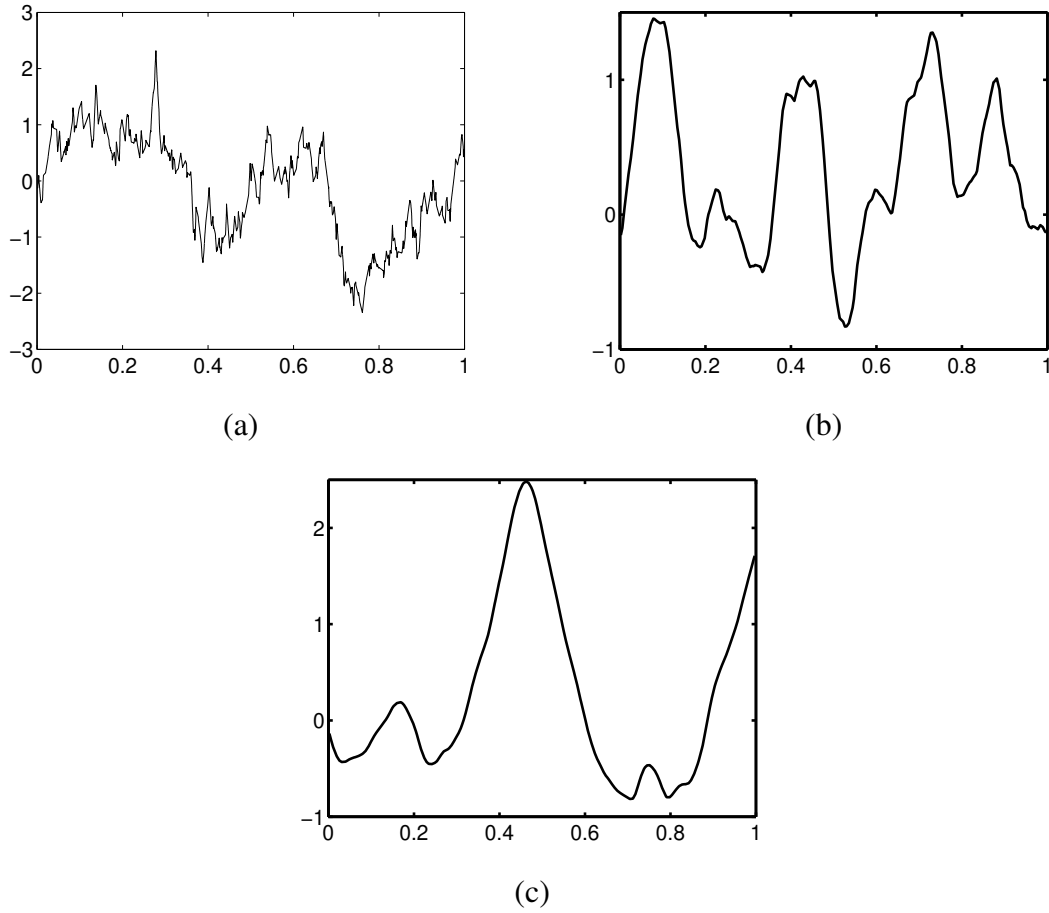


FIGURE 3.2 – Réalisations de trajectoires de processus gaussiens avec une structure de covariance de Matérn pour $\ell = 0.1$, $d = 1$ et : (a) $\nu = 1/2$, (b) $\nu = 3/2$ et (c) $\nu = 5/2$.

par

$$\sqrt{(u - v)'M^{-1}(u - v)}, \quad (3.16)$$

avec la matrice M définie dans (3.10).

Dans tous les exemples de trajectoires représentés jusqu'ici, nous avons fixé la valeur de ℓ à 0.1. Il est intéressant d'observer comment le choix de ce paramètre influence l'allure de la réalisation des trajectoires de processus gaussien, que ce soit pour le noyau gaussien ou pour les noyaux de Matérn. En particulier, on peut voir dans la figure 3.3 sur les exemples de covariance gaussienne et Matérn avec le paramètre $\nu = 3/2$ comment est modifiée la trajectoire pour $\ell = 0.05$, $\ell = 0.2$ et $\ell = 1$.

Dans les chapitres 4 et 5, nous utiliserons trois exemples de réalisations de processus gaussien que nous avons illustrées dans cette partie, et que nous définissons avec les notations suivantes :

$$g_1 : \begin{cases} [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R} \\ x \longmapsto g_1(x) \end{cases}, \quad (3.17)$$

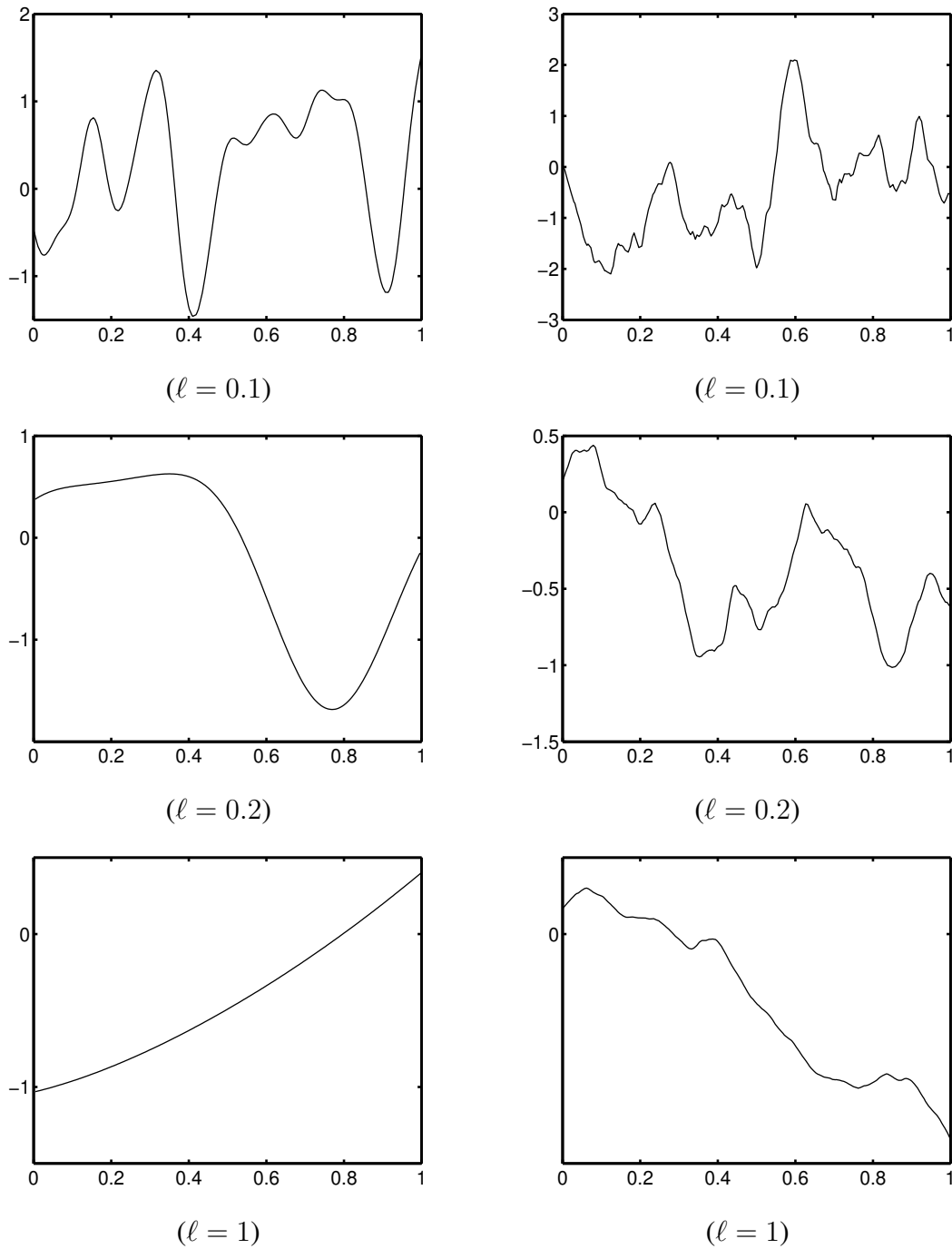


FIGURE 3.3 – Exemples de réalisations de trajectoires de processus gaussien en faisant varier ℓ , pour le noyau gaussien dans la colonne de gauche, et pour le noyau de Matérn avec $\nu = 3/2$ dans la colonne de droite..

représentée dans la figure 3.1 (a), réalisation d'une trajectoire de processus gaussien avec un

noyau gaussien défini dans (3.8), avec $d = 1$ et $l = 0.1$,

$$g_2 : \begin{cases} [0, 1]^2 \longrightarrow \mathbb{R} \\ x \longmapsto g_2(x) \end{cases}, \quad (3.18)$$

représentée dans la figure 3.1 (b), réalisation d'une trajectoire de processus gaussien avec un noyau gaussien défini dans (3.8), avec $d = 2$ et $l = 0.1$,

$$g_3 : \begin{cases} [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R} \\ x \longmapsto g_3(x) \end{cases}, \quad (3.19)$$

représentée dans la figure 3.2 (a), réalisation d'une trajectoire de processus gaussien avec un noyau de Matérn de paramètre $\nu = 1/2$ défini dans (3.13), avec $d = 1$ et $l = 0.1$.

3.2.2 Simulation d'une trajectoire de processus gaussien

Dans ce paragraphe, nous allons expliquer comment nous procédons pour simuler une trajectoire de processus gaussien en pratique.

Commençons par le cas simple où moyenne et covariance du processus gaussiens sont donnés et l'on souhaite simuler une réalisation de trajectoire en des points z_1, \dots, z_l donnés dans $[0, 1]^d$. Supposons que la moyenne et la covariance du processus gaussien sont, par exemple, $\mu_t(\cdot)$ et $k_t(\cdot, \cdot)$ définies dans (3.6) et (3.7). La procédure est décrite dans l'algorithme 2.

Algorithme 2 Simulation d'une trajectoire d'un $GP(\mu_t(\cdot), k_t(\cdot, \cdot))$

Entrée : z_1, \dots, z_l de $[0, 1]^d$ où l'on souhaite évaluer une réalisation de trajectoire de $GP(\mu_t(\cdot), k_t(\cdot, \cdot))$

- Évaluer $M = [\mu_t(z_1) \ \dots \ \mu_t(z_l)]'$ et $B = [k_t(z_i, z_j)]_{1 \leq i, j \leq l}$ en utilisant l'algorithme 1
 - Utiliser la factorisation de Cholesky pour calculer la matrice triangulaire inférieure C telle que $CC' = B + \sigma^2 I_l$
 - Tirer un vecteur Z selon une loi $\mathcal{N}(0, I_l)$
 - La réalisation de la trajectoire est donnée par $M + CZ$
-

σ^2 tient le même rôle que dans l'algorithme 1 : il s'agit d'une valeur très faible que l'on ajoute à la matrice dont on souhaite faire la décomposition de Cholesky pour éviter les problèmes numériques.

L'algorithme 2 ne suffit pas à expliquer comment les fonctions g_1 , g_2 et g_3 sont construites. En effet, s'il est facile de simuler une trajectoire de processus gaussien sur une grille donnée, comment faire pour connaître l'image d'un point $x \in [0, 1]^d$ qui n'est pas dans cette grille ? Nous expliquons ici la méthode que nous avons utilisée.

Sous les hypothèses de la Proposition 2.2, pour $d(\mu s) = p(s)ds$ (où p est la densité de probabilité de la loi de X), il existe une base orthonormale de fonctions propres $(h_n, n \in \mathbb{N})$ de l'opérateur de covariance k telle que

$$x \mapsto kh_n(x) = \int_{[0,1]^d} k(s, x)h_n(s)p(s)ds .$$

En notant $\lambda_n, n \in \mathbb{N}$ les valeurs propres correspondantes, $kh_n = \lambda_n h_n$, et pour tout x dans $[0, 1]^d$, on a

$$\lambda_n h_n(x) = \int_{[0,1]^d} k(s, x)h_n(s)p(s)ds .$$

Pour calculer cette intégrale, on peut utiliser l'approximation suivante :

$$\int_{[0,1]^d} k(s, x)h_n(s)p(s)ds \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(x_i, x)h_n(x_i) ,$$

où les x_i sont échantillonnés selon la loi de X . Ainsi, si on prend $x = x_i$ pour $i = 1, \dots, N$, on se retrouve avec un problème matriciel tel que

$$K\mathbf{u}_n = \lambda_n^{mat} \mathbf{u}_n ,$$

avec K une matrice de Gram de taille $N \times N$ telle que $(K)_{nm} = k(x_n, x_m)$, λ_n^{mat} est la $n^{\text{ème}}$ matrice des valeurs propres et \mathbf{u}_n le vecteur propre correspondant (normalisé de façon à ce que $\mathbf{u}_n' \mathbf{u}_n = 1$). On a alors $h_n(x_m) \simeq \sqrt{N}(\mathbf{u}_n)_m$, où le facteur \sqrt{N} vient des normalisations du vecteur propre et de la fonction propre (voir [Rasmussen and Williams, 2006] pour plus de détails). L'approximation de la $n^{\text{ème}}$ fonction propre est donnée par

$$h_n(x) \simeq \frac{\sqrt{N}}{\lambda_n^{mat}} \mathbf{k}(x)' \mathbf{u}_n ,$$

avec $\mathbf{k}(x)' = [k(x_1, x) \dots k(x_N, x)]$. Cette méthode s'appelle la méthode de Nyström, voir [Rasmussen and Williams, 2006] pour les détails et les références. Nous résumons dans l'algorithme 3 comment nous avons procédé pour implémenter cette méthode. Notons que N doit être choisi assez grand pour assurer la convergence de la somme. Dans notre cas, nous avons choisi $N = 500$ pour les fonctions en dimension 1 g_1 et g_3 définies respectivement dans (3.17) et (3.19), et $N = 1000$ pour la fonction g_2 définie dans (3.18).

Maintenant que nous avons mis en place la modélisation que nous allons utiliser, nous pouvons passer à la description de nos méthodes séquentielles pour l'estimation d'un quantile, et à leur comparaison sur les fonctions g_1, g_2 et g_3 (ainsi qu'à une réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 3 que nous n'avons pas représentée).

Algorithm 3 Fonction “réalisation de trajectoire de processus gaussien” $GP(0, k(., .))$

Entrée : x dans $[0, 1]^d$

Construction de la fonction :

- Échantillonner x_1, \dots, x_N selon la loi des entrées X (dans notre cas nous supposons une loi uniforme sur $[0, 1]^d$). Ces points sont maintenant **fixés**.
- Évaluer la matrice $K = [k(x_n, x_m)]_{1 \leq n, m \leq N}$
- Calculer les valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ et la base orthonormée des vecteurs propres u_1, \dots, u_N de la matrice K
- Tirer un vecteur Z selon une loi $\mathcal{N}(0, I_N)$, $Z = [z_1 \dots z_N]'$. Z est **fixé** également, il détermine la réalisation de la trajectoire.

Évaluation en un point x donné :

- Évaluer $\mathbf{k}(x)' = [k(x_1, x) \dots k(x_N, x)]$
- L'image de x par la fonction construite est donnée par $\sum_{n=1}^N \frac{\sqrt{\lambda_n}}{\lambda_n} \mathbf{k}(x)' u_n \frac{z_n}{\lambda_n}$

Chapitre 4

Méthodes de planification séquentielle d'expériences numériques pour l'estimation d'un quantile

Résumé

Dans ce chapitre, nous allons présenter quatre méthodes séquentielles pour estimer un quantile de la distribution de $Y = f(X)$ en utilisant le moins possible de réalisations de Y , où f est une fonction inconnue, à valeurs réelles, coûteuse à évaluer, et X est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^d dont la distribution est supposée connue. Toutes les stratégies décrites ici se fondent sur l'utilisation d'un métamodèle gaussien pour représenter la fonction f . Après une introduction sur les méthodes séquentielles et l'estimation d'un α -quantile, nous présenterons dans la partie 4.2, nos deux méthodes nommées GPS et GPS+. Les parties suivantes sont consacrées à l'adaptation de deux méthodes existantes au problème d'estimation d'un quantile. Plus précisément, nous présenterons dans la partie 4.3 la stratégie SUR (*Stepwise Uncertainty Reduction*) et des variantes possibles autour de cette méthode, qui a été initialement introduite dans [Bect et al., 2012] pour l'estimation de $\mathbb{P}(Y \geq s)$, où s est un seuil donné. D'autre part, la méthode pour l'estimation d'un contour (c'est-à-dire de l'ensemble des points x tels que $f(x) = a$, où a est une valeur donnée) présentée dans [Ranjan et al., 2008] sera adaptée à l'estimation d'un quantile dans la partie 4.4. Enfin, les preuves et détails des calculs sont donnés dans la partie 4.5.

4.1 Introduction

Dans cette partie, nous allons présenter plusieurs méthodes séquentielles pour la mise en place de plans d’expériences pour l’estimation d’un quantile de la distribution de $Y = f(X)$, où f est une fonction inconnue, à valeurs réelles, et X est un vecteur dont les coordonnées sont les paramètres du modèle (par exemple, dans le cas du DAS, ces paramètres peuvent être l’azimut et l’élévation de l’onde incidente, les propriétés diélectriques des tissus, etc.). On suppose que ce vecteur de paramètres est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^d dont la distribution est connue.

L’idée de développer des stratégies séquentielles pour l’estimation d’un quantile de la distribution de Y vient du fait que nous souhaitons avoir recours au moins possible d’évaluations de la fonction f , celle-ci étant très coûteuse à évaluer. En effet, pour une valeur donnée des paramètres x dans \mathbb{R}^d , un calcul dure d’une à plusieurs heures selon le modèle de corps humain utilisé, avec un ordinateur ayant la configuration suivante : RAM 16 GB, CPU 4 GHz. L’utilisation d’une méthode d’échantillonnage classique (telle que les tirages de Monte-Carlo, décrits dans [Lemieux, 2009], ou les hypercubes latins) ou d’une méthode de quasi Monte-Carlo (décrites dans [Forrester et al., 2008, Chapitre 1]) ne peut donc être envisagée. Ces méthodes d’échantillonnage sont utilisées pour estimer un quantile empirique, que nous définirons au chapitre 5 ; on peut aussi utiliser la formule de Wilks (voir [Wilks, 1941]) pour déterminer la taille de l’échantillon qui servira à estimer le quantile (voir [de Crécy et al., 2008], [Pérot and Iooss, 2008], [Zio and De Maio, 2008])

Au contraire de ces plans d’expériences “fixes”, les méthodes séquentielles permettent d’exploiter les observations précédentes et de diriger le choix du prochain point selon la quantité d’intérêt à estimer : elles apparaissent donc particulièrement indiquées dans un cas où l’on doit se montrer le plus parcimonieux possible en évaluations de f . Nous nous plaçons ici dans le cadre décrit au Chapitre 3, en posant un a priori de processus gaussien sur notre fonction inconnue f : ce métamodèle va nous permettre d’optimiser un critère adapté à l’estimation de notre quantité d’intérêt (un quantile) qui nous indique pour quelles valeurs de x évaluer f . Ce type d’approche a été largement développé dans le domaine de l’optimisation bayésienne.

L’optimisation bayésienne a pour objectif de trouver le maximum de la fonction f , et se fonde sur l’utilisation d’un métamodèle gaussien et l’optimisation d’un critère dont le résultat va désigner le prochain point d’évaluation de f , ce qui est très proche des méthodes que nous développons ici. Tels qu’ils sont décrits dans [Brochu et al., 2010], les critères d’optimisation bayésienne sont également appelés fonction d’acquisition (“*acquisition function*”). On peut faire la distinction entre deux types particulièrement populaires : d’une part, ceux qui vont chercher à ajouter le point qui va permettre d’améliorer l’estimation du maximum (“*expected improvement*”) ; d’autre part, ceux qui se fondent sur l’utilisation de bornes de confiance construites à partir de la loi du processus (“*confidence bound criteria*”), par exemple, pour trouver le maximum de f , un point est sélectionné s’il maximise une borne de confiance supérieure à f avec une grande probabilité. Comme exemple de cette dernière approche, on peut citer l’algorithme “GP-UCB” proposé dans [Srinivas et al., 2012] et amélioré dans [de Freitas et al., 2012]. Pour un exemple d’algorithme “EI” (“*expected improvement*”) avec des preuves de convergence, on peut citer [Vazquez and Bect, 2010].

Les stratégies séquentielles ont également été utilisées pour estimer des quantités d’intérêt

autres que le maximum de la fonction f . Ainsi, [Bect et al., 2012] présentent le critère baptisé *Stepwise Uncertainty Reduction* (SUR) pour estimer $\mathbb{P}(Y \geq s)$, où s est un seuil donné. De plus, [Ranjan et al., 2008] proposent une méthode dédiée au problème d'estimation d'un contour. Les critères introduits dans ces deux articles sont des critères que l'on pourrait qualifier de type "EI", "*expected improvement*", si l'on se réfère à l'optimisation bayésienne. Dans ce chapitre, nous allons adapter ces deux méthodes à l'estimation d'un quantile de la distribution de $Y = f(X)$, afin de pouvoir les comparer avec nos deux nouvelles méthodes (voir chapitre 5).

En ce qui concerne l'estimation d'un quantile de $f(X)$, on trouve dans [Oakley, 2004] une méthode fondée également sur l'utilisation d'un métamodèle gaussien, mais la stratégie décrite dans l'article n'est pas vraiment séquentielle, même si elle se joue en deux étapes. La première étape consiste à choisir sur tout l'espace de recherche un certain nombre de points où f est évaluée, afin d'identifier les régions de l'espace pour lesquelles les valeurs de Y sont élevées. Dans un deuxième temps, f sera évaluée sur de nouveaux points choisis exclusivement dans ces zones. À partir de toutes les observations, un métamodèle gaussien est construit ; l'auteur propose de faire de l'inférence sur le quantile à partir d'un échantillon obtenu en tirant plusieurs trajectoires de la distribution du processus gaussien obtenu (comme expliqué dans la partie 3.2.2) et d'estimer le quantile de chacune de ces réalisations de trajectoire. En utilisant ce procédé, on peut choisir comme estimateur du quantile la moyenne des quantiles obtenus sur l'ensemble des trajectoires de processus gaussien. Nous avons fait quelques essais sur les méthodes que nous allons présenter ici, en comparant les performances d'un même algorithme selon que l'estimateur du quantile était le quantile de la moyenne du processus gaussien (défini plus loin dans (5.2)) ou la moyenne des quantiles (calculée comme nous venons de le décrire) ; les résultats ont été meilleurs dans le premier cas, ce qui nous a conduit à renoncer à la seconde méthode, qui de surcroît était bien plus coûteuse.

Les stratégies que nous proposons ici, appelées GPS (pour *Gaussian Process Shrunk*) et GPS+, sont fondées sur l'utilisation de bornes de confiance sur la valeur du quantile que l'on cherche à estimer (à la manière d'un "*confidence bound criterion*" de l'optimisation bayésienne) : l'objectif est d'apprendre la fonction f dans les régions de l'espace de recherche qui pourraient se révéler utiles pour l'estimation du quantile. GPS peut faire penser à la méthode décrite dans [Oakley, 2004], car le critère proposé par l'auteur est proche de celui que nous avons mis en place ici. Néanmoins, notre stratégie est différente car elle n'autorise qu'une seule évaluation de f à la fois. De plus, nous allons montrer que notre méthode fournit des intervalles de confiance sur l'estimation du quantile à chaque itération, ce qui peut permettre de déterminer si l'on doit avoir recours à un plus grand nombre d'évaluations de f , ou si le processus peut être arrêté avant d'avoir épuisé le budget d'évaluations autorisées pour f . D'autre part, GPS+ est une amélioration de la stratégie GPS : on densifie l'espace de recherche dans les zones d'intérêt pour l'estimation du quantile. Cette modification de GPS rappelle la méthode proposée par [de Freitas et al., 2012] en amélioration de l'algorithme "GP-UCB" de [Srinivas et al., 2012] pour la maximisation de fonctions, même si nous ne procédons pas de la même manière pour ajouter des points dans la zone de recherche.

Les stratégies que nous allons décrire dans la suite (nos méthodes GPS et GPS+, et les adaptations de la méthode SUR et de la méthode de [Ranjan et al., 2008]) sont destinées à l'estimation de l' α -quantile q_α de la distribution de $Y = f(X)$, qui est défini, pour un α donné dans $(0, 1)$,

par

$$q_\alpha = \inf \{q : \mathbb{P}(f(X) \leq q) > \alpha\} \quad (4.1)$$

où f est une fonction inconnue à valeurs réelles et X est un vecteur aléatoire dont la distribution sur un compact $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{R}^d$ est supposée connue. Notons par ailleurs que, dans nos applications aux données réelles, il sera question de l'estimation d'un quantile à 95% de la distribution du DAS (soit $\alpha = 0.05$ dans (4.1)), et par conséquent nous ne nous intéresserons pas ici à l'estimation de quantiles extrêmes (pour lesquels α serait très petit, de l'ordre de 10^{-4} , 10^{-9} ou 10^{-13} , par exemple).

Nous allons considérer f comme la réalisation d'un processus gaussien de moyenne nulle et de fonction de covariance k , qui sera noté $GP(0, k(\cdot, \cdot))$. Les détails de cette modélisation ont été décrits dans le chapitre 3. L'estimation d'un quantile de la distribution de $Y = f(x)$, où f est modélisée par processus gaussien, est décrite dans [Rutherford, 2006], [Arnaud et al., 2010]; ces articles proposent de simuler un grand nombre de trajectoires suivant la loi a posteriori (conditionnellement aux observations) du processus gaussien, et d'estimer le quantile par la moyenne empirique des quantiles empiriques évalués pour chacune des trajectoires. Pour nos applications à des données synthétiques (voir chapitre 5) nous avons pris en compte cette possibilité, mais nous avons préféré retenir comme estimateur le quantile empirique de la moyenne a posteriori du processus gaussien.

Nous allons comparer les estimateurs du quantile à $\tilde{q}_{\alpha, m}$ défini comme suit

$$\tilde{q}_{\alpha, m} = \inf \left\{ q : \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{f(x_i) \leq q\}} > \alpha \right\}, \quad (4.2)$$

où x_1, \dots, x_m sont m points fixés dans \mathcal{A} . Ces points peuvent être choisis comme m réalisations indépendantes du vecteur aléatoire X ou en utilisant une méthode de quasi-Monte Carlo (voir [Lemieux, 2009]). Dans la suite, A désignera l'ensemble suivant :

$$A = \{x_1, \dots, x_m\} \subset \mathcal{A}, \quad (4.3)$$

où \mathcal{A} est un compact de \mathbb{R}^d . Par ailleurs, pour simplifier les notations, $\tilde{q}_{\alpha, m}$ sera noté \tilde{q}_α .

4.2 Méthodes GPS et GPS+

Étant donné la définition de \tilde{q}_α , on peut penser qu'une approche naturelle pour obtenir une estimation précise de \tilde{q}_α serait de chercher une estimation précise de f . Ainsi, une stratégie appropriée pourrait être fondée sur un "critère d'exploration pure" (voir [Sacks et al., 1989], [Forrester et al., 2008, Section 3], et les références associées) qui minimise l'incertitude globale sur l'estimation de la fonction f . En suivant cette méthode, si l'on suppose que t observations ont déjà été réalisées, le nouveau point x_{t+1} où f va être évaluée est sélectionné parmi les points d'une grille fine A de \mathcal{A} tel que

$$x_{t+1} \in \arg \max_{x \in A} \sigma_t(x), \quad (4.4)$$

avec $\sigma_t(x)^2 = k_t(x, x)$ est défini dans (3.7), $\arg \max_{x \in A} \sigma_t(x)$ est l'ensemble des $x \in A$ où $\sigma_t(x)$ atteint son maximum et A, \mathcal{A} sont définis dans (4.3). Cependant, comme cette stratégie n'est pas destinée à l'estimation d'un quantile, on peut penser qu'elle demandera plus d'évaluations de la fonction f qu'une méthodologie qui reposerait sur un critère spécifique. Par conséquent, nous allons proposer des méthodes qui se veulent adaptées au problème de l'estimation d'un quantile.

4.2.1 Méthode GPS

Comme nous nous intéressons à l'estimation d'un quantile de la distribution de $Y = f(\mathbb{X})$, notre objectif est d'échantillonner f dans les zones qui sont pertinentes pour l'estimation d'un quantile. Ainsi, au lieu d'essayer de réduire l'incertitude globale sur l'estimation de f en utilisant le critère (4.4) sur tous les points de la grille A , notre stratégie réduit, pas à pas, l'incertitude sur f uniquement dans les régions qui contribuent à l'estimation d'un quantile. Inspirés par l'algorithme GP-UCB proposé par [Srinivas et al., 2012] pour estimer le maximum de la fonction f , nous allons utiliser les mêmes définitions pour UCB (*Upper Confidence Bound*, la borne de supérieure d'une région de confiance sur la fonction f) et LCB (*Lower Confidence Bound*, la borne de confiance inférieure). UCB et LCB seront notées μ_t^U et μ_t^L , et leur définition est la suivante, étant donné un ensemble $\{x_1, \dots, x_t\}$ de points pour lesquels f a été évaluée :

$$\mu_t^U(x) = \mu_t(x) + \sqrt{\beta_t \sigma_t(x)} \text{ and } \mu_t^L(x) = \mu_t(x) - \sqrt{\beta_t \sigma_t(x)}, \quad (4.5)$$

avec

$$\beta_t = 2 \ln \left(\frac{\pi^2 t^2}{6} \right) + 2 \ln \left(\frac{m}{\delta} \right), \quad (4.6)$$

où m est cardinal de A défini dans (4.3) et δ est dans $(0, 1)$.

À partir de ces fonctions, on peut estimer les α -quantiles de μ_t^U et μ_t^L par $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ et $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ tels que

$$\hat{q}_{\alpha,t}^U = \inf \left\{ q : \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^U(x_i) \leq q\}} > \alpha \right\} \text{ and } \hat{q}_{\alpha,t}^L = \inf \left\{ q : \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) \leq q\}} > \alpha \right\}, \quad (4.7)$$

où x_1, \dots, x_m sont définis dans (4.2). Avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, où δ est dans $(0, 1)$, pour tout entier t et pour tout ensemble $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ distincts deux à deux, \tilde{q}_α appartient à l'intervalle $[\hat{q}_{\alpha,t}^L, \hat{q}_{\alpha,t}^U]$. Plus précisément, nous pouvons énoncer le résultat suivant, qui est démontré dans la partie 4.5.

Proposition 2.3. *Soit f une réalisation d'une trajectoire d'un processus gaussien $GP(0, k(\cdot, \cdot))$ et \tilde{q}_α défini dans (4.2), alors, pour tout δ dans $(0, 1)$, $\tilde{q}_\alpha \in [\hat{q}_{\alpha,t}^L, \hat{q}_{\alpha,t}^U]$ pour tout $t \geq 1$, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, où $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ and $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ sont définis dans (4.7).*

Notons $U_{\alpha,t}$ et $L_{\alpha,t}$ les ensembles suivants

$$U_{\alpha,t} = \left\{ x \in A : \mu_t^U(x) \geq \hat{q}_{\alpha,t}^L \right\} \text{ and } L_{\alpha,t} = \left\{ x \in A : \mu_t^L(x) \leq \hat{q}_{\alpha,t}^U \right\}, \quad t \geq 1. \quad (4.8)$$

L'estimateur du quantile $\hat{q}_{\alpha,t}$ calculé à partir de t évaluations de la fonction f est défini par

$$\hat{q}_{\alpha,t} = \inf \left\{ q : \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) \leq q\}} > \alpha \right\} . \quad (4.9)$$

Avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, où δ est dans $(0,1)$, pour tout entier t et pour tout ensemble $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ distincts deux à deux, \tilde{q}_α appartient à l'intervalle $[\hat{q}_{\alpha,t} - \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x); \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x)]$. Plus précisément, nous pouvons énoncer le résultat suivant, qui est démontré dans la partie 4.5.

Proposition 2.4. *Soit $\hat{q}_{\alpha,t}$ défini par (4.9) et \tilde{q}_α défini par (4.2) alors, sous les hypothèses de la Proposition 2.3, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, pour tout $t \geq 1$,*

$$|\hat{q}_{\alpha,t} - \tilde{q}_\alpha| \leq \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) , \quad (4.10)$$

où β_t est défini dans (4.6) et $U_{\alpha,t}$ dans (4.8).

Fondée sur ce résultat, notre stratégie consiste à ajouter un nouveau point à l'ensemble des observations en utilisant (4.4), mais en maximisant σ_t uniquement sur $U_{\alpha,t}$. En résumé, il s'agit de maximiser le critère d'exploration pure (4.4) mais restreint à une région où le quantile a une grande probabilité de se trouver.

De plus, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, où δ est dans $(0,1)$, pour tout entier t et pour tout ensemble $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ distincts deux à deux, et pour tout x dans $U_{\alpha,t} \cap L_{\alpha,t}$, $f(x)$ appartient à l'intervalle $[\tilde{q}_\alpha - 4\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x); \tilde{q}_\alpha + 4\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x)]$. Plus précisément, nous pouvons énoncer le résultat suivant, qui est démontré dans la partie 4.5.

Proposition 2.5. *Sous les hypothèses de la Proposition 2.3, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, pour tout $t \geq 1$ et pour tout $x \in U_{\alpha,t} \cap L_{\alpha,t}$, nous avons*

$$\tilde{q}_\alpha - 4\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) \leq f(x) \leq \tilde{q}_\alpha + 4\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) , \quad (4.11)$$

où $U_{\alpha,t}$ et $L_{\alpha,t}$ sont définis dans (4.8).

Ce résultat implique que les valeurs prises par la fonction f aux points appartenant à l'ensemble $U_{\alpha,t} \cap L_{\alpha,t}$ sont proches de la valeur du α -quantile.

Étant donnés ces définitions et résultats, nous allons résumer dans l'Algorithme 4 comment notre stratégie, nommée GPS pour *Gaussian Process Shrunk* (puisque'il s'agit de réduire la taille d'un ensemble), fonctionne. Nous commençons par évaluer f à un petit nombre t_1 de points choisis aléatoirement parmi les points de la grille fine A de \mathcal{A} . Ainsi, après t évaluations de f , le nouveau point x_{t+1} à ajouter à l'ensemble des t observations précédentes est tel que :

$$x_{t+1} \in \arg \max_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) , \quad (4.12)$$

où $\sigma_t(x)^2 = k_t(x, x)$ est défini dans (3.7). On itère ce processus jusqu'à ce que le nombre T d'évaluations autorisées de f soit atteint. Notons qu'il est envisageable de s'arrêter avant d'avoir épuisé le budget d'évaluations de f , si l'on estime que l'intervalle $[\hat{q}_{\alpha,t}^L, \hat{q}_{\alpha,t}^U]$ est suffisamment précis.

Algorithm 4 GPS

Entrée : x_1, \dots, x_{t_1} un petit nombre de points de A où f a été évaluée

Pour $t = t_1, t_1 + 1, \dots, T$

- Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien ainsi que $\sigma_t(x)^2$ en utilisant (3.6) et (3.7)
- Évaluer $\hat{q}_{\alpha,t}$ avec (4.9), $\hat{\mu}_t^U$ et $\hat{\mu}_t^L$, $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ et $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ avec (4.5), (4.7), et finalement $U_{\alpha,t}$ avec (4.8)
- Choisir x_{t+1} selon (4.12)
- Évaluer f en ce point : $y_{t+1} = f(x_{t+1})$
- Ajouter cette nouvelle observation à l'ensemble ; $t = t + 1$

Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien et $\hat{q}_{\alpha,t}$ en utilisant (4.9).

Illustration de GPS pas à pas

Pour illustrer le déroulement de la méthode GPS, nous utilisons l'exemple de la fonction g_1 définie dans (3.17), réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 1 avec une fonction de covariance gaussienne (définie dans (3.9), avec $\ell = 0.1$) représentée dans la figure 3.1 (a). Le résultat se trouve dans la figure 4.1.

On commence avec trois points choisis au hasard dans une grille A de cardinal 100. Les points de A sont représentés par des étoiles bleues à $y = 0$. Les points qui sont ajoutés à l'ensemble des observations sont faciles à discerner car ils se situent à l'endroit où μ_t^U et μ_t^L coïncident, μ_t^U et μ_t^L étant définis dans (4.5). Ainsi, dans la figure 4.1, pour $t = 3$ aucun point n'a encore été sélectionné par la méthode.

Puis, pour $t = 6$, trois itérations plus tard, trois points ont été ajoutés, mais l'espace de recherche n'a pas encore été significativement réduit. Ce n'est qu'à l'itération suivante que l'on peut voir que tous les points inférieurs à 0.2 ont été écartés de l'espace de recherche. Notre critère (4.12) est alors facile à observer : la courbe en cyan qui représente μ_t^U est en dessous de la courbe noire représentant le quantile à 95% de μ_t^L .

On peut voir dans la figure 4.1 que 9 points ont été ajoutés à l'ensemble des observations par la méthode, et que la grille de l'espace de recherche est réduite à quelques points. De plus, les quantiles $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ des bornes supérieures et inférieures (respectivement μ_t^U et μ_t^L) définis dans (4.7) sont confondus avec \tilde{q}_α défini dans (4.2) ; si l'on revient aux figures précédentes, on voit que ces bornes n'ont cessé de se resserrer autour du vrai quantile à chaque itération, ce qui confirme l'efficacité de la méthode.

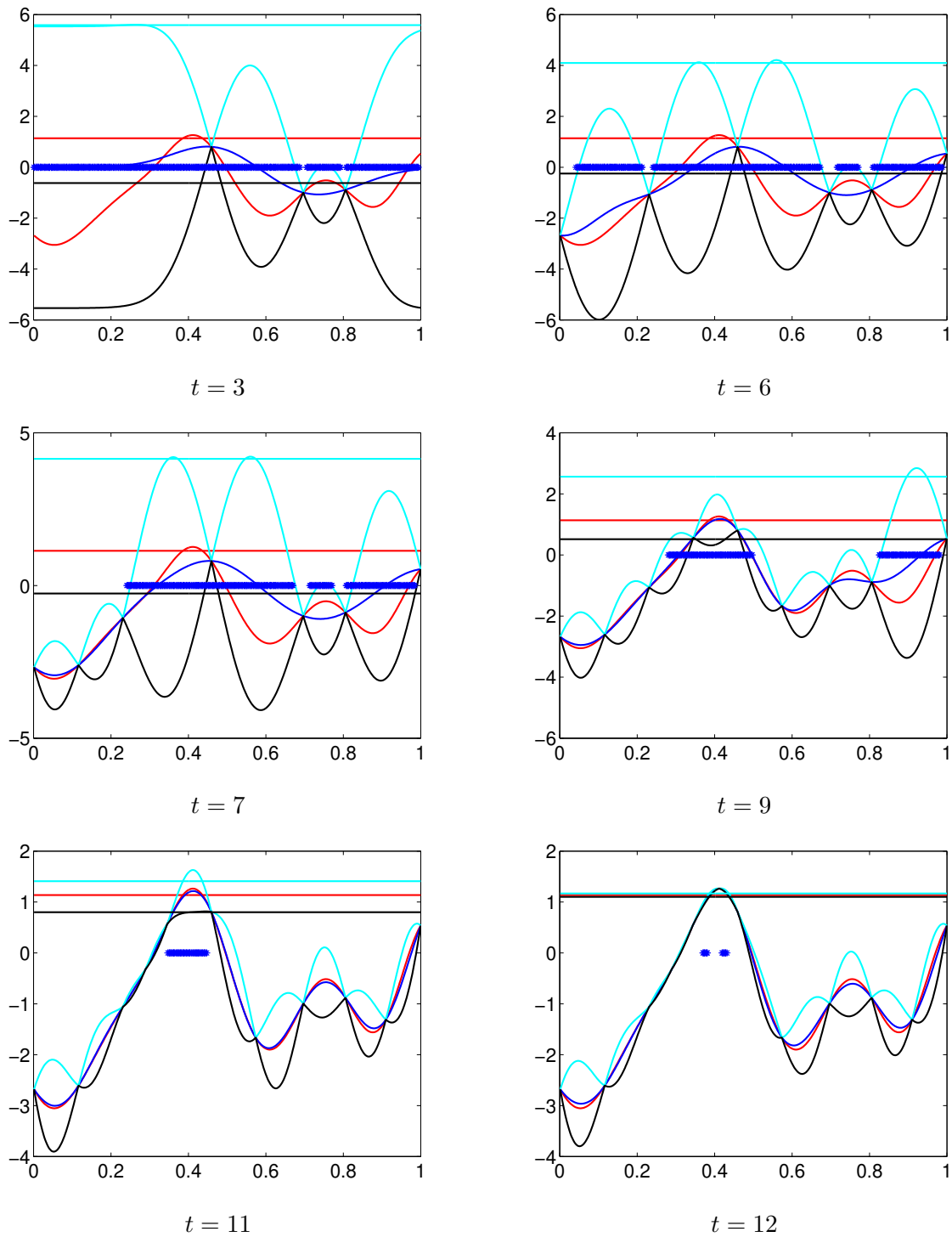


FIGURE 4.1 – Illustration pas à pas de l’application de la méthode GPS. f et \tilde{q}_α en rouge, μ_T en bleu, μ_t^U et $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ en bleu cyan, μ_t^L et $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ en noir ; les étoiles bleues sont les points de l’axe des abscisses qui appartiennent à l’ensemble de recherche de maximum de $\sigma_t(x)$.

4.2.2 Méthode GPS+

Nous allons à présent décrire notre stratégie GPS+. Cette stratégie est une variante de GPS, qui peut se révéler utile dans certains cas.

Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, notre algorithme GPS repose sur le choix d'une grille A de cardinal m définie dans (4.3) ; cette grille sert à calculer $\hat{q}_{\alpha,t}$, $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ et $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ définis dans (4.9) et (4.7). On peut donc penser que si cette grille ne contient pas assez de points pour permettre à l'algorithme de puiser dans des valeurs assez proches de celles du vrai α -quantile, on ne pourra jamais fournir une estimation précise du quantile. Pour dépasser cette limitation induite par le choix de la grille initiale, GPS+ permet d'évaluer f en des points qui ne font pas forcément partie de la grille A . Nous verrons au cours du Chapitre 5, que le fait d'évaluer la fonction f en des points qui sont situés hors de l'ensemble A peut permettre d'améliorer l'estimation de f dans les zones qui sont intéressantes pour l'évaluation du quantile et donc en améliorer l'estimation. Notons cependant que nous aurons toujours besoin d'une grille sous-jacente pour estimer le quantile ; nous prendrons la même grille pour toutes les méthodes.

Ceci ajoute une étape avant de choisir x_{t+1} , car il nous faut définir un nouvel espace de recherche contenant plus de points. On procède de la façon suivante. Supposons que f a déjà été évaluée aux points x_1, \dots, x_t ; soit $\mathcal{S}_{\alpha,t} \subseteq \mathcal{A}$ un sous ensemble compact tel que

$$\mathcal{S}_{\alpha,t} = \prod_{i=1}^d [x_{\min,t}^{(i)}, x_{\max,t}^{(i)}] . \quad (4.13)$$

Ici $x_{\min,t}^{(i)}$ dénote la i ème plus petite composante des points de $\bar{U}_{\alpha,t}$ et $x_{\max,t}^{(i)}$ la plus grande, avec $\bar{U}_{\alpha,t}$ défini par

$$\bar{U}_{\alpha,t} = \left\{ x \in \mathcal{S}_{\alpha,t-1} : \mu_t^U(x) \geq \hat{q}_{\alpha,t}^L \right\} , \quad (4.14)$$

où $\mathcal{S}_{\alpha,t-1}$ désigne l'espace de recherche à l'itération $t - 1$. Cet espace de recherche est défini itérativement comme suit :

$$\mathcal{S}_{\alpha,t} = \{x_{t,1}, \dots, x_{t,m_t}\} \cup \bar{U}_{\alpha,t} ,$$

où $\{x_{t,1}, \dots, x_{t,m_t}\}$ sont m_t points choisis aléatoirement dans $\mathcal{S}_{\alpha,t}$. Par convention, $\mathcal{S}_{\alpha,0} = A$. Le nouveau point à ajouter à l'ensemble des observations est donc :

$$x_{t+1} \in \arg \max_{x \in \bar{U}_{\alpha,t}} \sigma_t(x) , \quad (4.15)$$

où $\sigma_t(x)^2 = k_t(x, x)$ est défini dans (3.7). Comme précédemment, le processus est itéré jusqu'à ce que le budget T d'évaluations de f préalablement alloué soit atteint. Dans la mesure où la taille de l'ensemble de recherche varie à chaque itération du processus, il faut adapter la définition de β_t , qui est défini ici de la façon suivante :

$$\beta_t = 2 \ln \left(\frac{\pi^2 t^2}{6} \right) + 2 \ln \left(\frac{|\mathcal{S}_{\alpha,t-1}|}{\delta} \right) . \quad (4.16)$$

On peut résumer la stratégie GPS+ dans l'Algorithme 5.

Algorithm 5 GPS+

Entrée : x_1, \dots, x_{t_1} un petit nombre de points de A où f a été évaluée

Pour $t = t_1, t_1 + 1, \dots, T$

- Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien ainsi que $\sigma_t(x)^2$ en utilisant (3.6) et (3.7)
- Évaluer $\hat{q}_{\alpha,t}$ avec (4.9), $\hat{\mu}_t^U$ et $\hat{\mu}_t^L$, $\hat{q}_{\alpha,t}^U$ et $\hat{q}_{\alpha,t}^L$ avec (4.5), (4.7) en prenant soin de prendre β_t selon (4.16), et finalement $\bar{U}_{\alpha,t}$ avec (4.14)
- Choisir x_{t+1} selon (4.15)
- Évaluer f en ce point : $y_{t+1} = f(x_{t+1})$
- Ajouter cette nouvelle observation à l'ensemble ; $t = t + 1$

Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien et $\hat{q}_{\alpha,t}$ en utilisant (4.9).

Illustration de GPS+ pas à pas

Voici comment se déroule la méthode GPS+ sur l'exemple de la fonction g_2 définie dans (3.18), réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 2 représentée dans la figure 3.1 (b) et (c) : quatre étapes sont représentées (voir la figure 4.2). On rappelle ici que les lignes de niveau les plus claires sur ces graphes de contour sont celles qui représentent les valeurs les plus élevées de la fonction.

Dans la figure 4.2 (a), f est évaluée en deux points (représentés sur la figure par '•') choisis au hasard dans une grille A de cardinal 200, dont les points sont représentés par de petits points noirs dans la figure 4.2. Ici, m_t est choisi tel que $m_t = |\bar{U}_{\alpha,t}|$; ainsi notre ensemble de recherche à l'étape t contient deux fois plus de points qu'à l'étape $t - 1$. Dans cet exemple, on peut voir que la phase d'exploration de l'algorithme est nettement plus longue qu'en dimension 1.

En effet, après 60 itérations de la procédure (soit 60 points sélectionnés par la méthode pour être ajoutés à l'ensemble des observations), on obtient le résultat représenté dans la figure 4.2 (b). Comme pour la figure précédente, les cercles gris '•' sont les points en lesquels f a été évaluée, et les points noirs '•' correspondent à l'espace de recherche dans lesquels les observations seront puisées, soit, dans le cas de GPS+, à $\bar{U}_{\alpha,t}$, défini dans (4.14). On peut observer que la zone des points x dont l'image par la fonction donne une valeur relativement basse a été écartée de l'espace de recherche, ce qui est cohérent puisque l'on s'intéresse au quantile à 95%.

Après 100 itérations (voir la figure 4.2 (c)) et 160 itérations (voir la figure 4.2 (d)) on observe que les points de l'ensemble de recherche pour constituer l'ensemble d'observations sont situés dans les zones qui produisent les valeurs de f les plus élevées. Cela nous permet de constater que la méthode s'est bien concentrée dans les zones qui peuvent présenter un intérêt pour l'estimation du quantile.

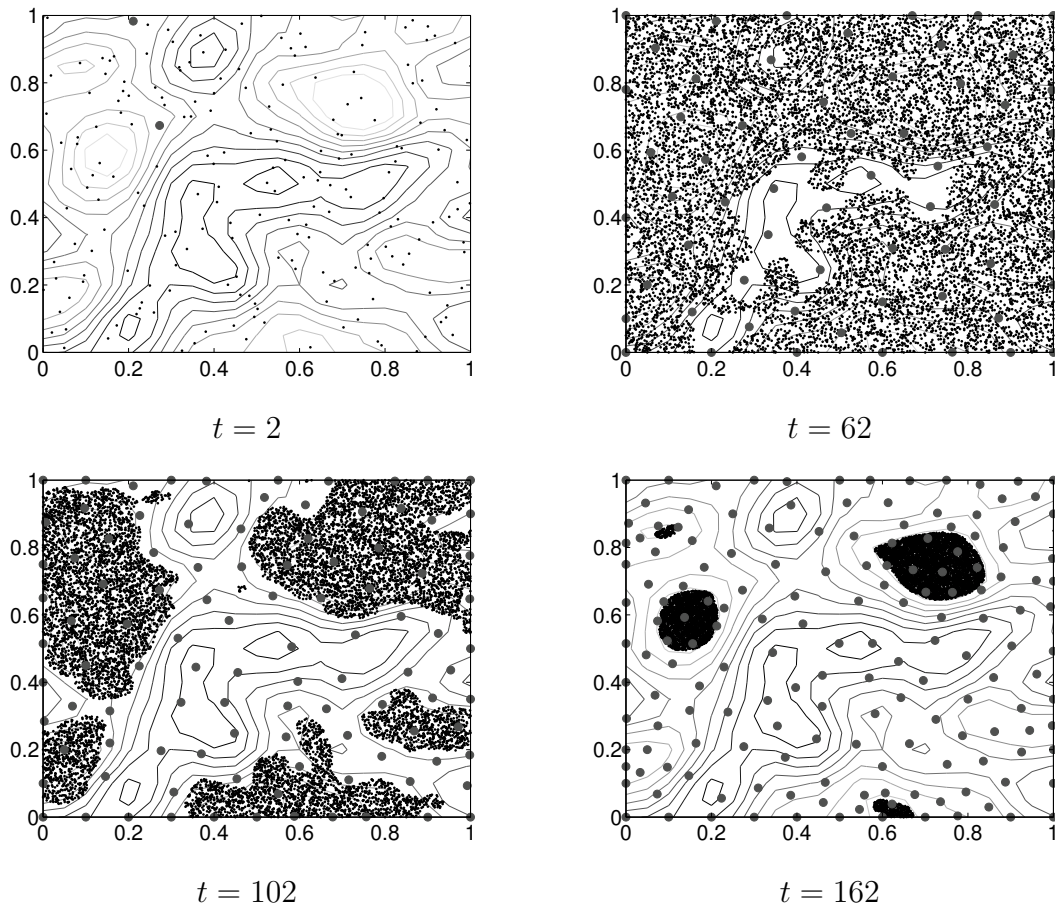


FIGURE 4.2 – Illustration de quatre étapes de l’application de la méthode GPS+. Sur chaque graphe sont représentés : les contours de la fonction f (en échelle de gris, les lignes de niveau les plus claires correspondent aux valeurs les plus élevées), les points déjà observés (\bullet), et les points qui appartiennent à l’espace de recherche densifié (\cdot).

4.3 Méthode SUR et variantes

Comme nous l’avons expliqué précédemment, à travers GPS et GPS+ nous avons mis en place des méthodes fondées sur l’utilisation de bornes de confiance construites à partir de la loi du processus (*confidence bound criterion*). On peut, de la même façon qu’en optimisation bayésienne pour la recherche du maximum, imaginer une approche avec un critère fondé sur la recherche du point qui, s’il est ajouté à l’ensemble des observations, améliorera le plus l’estimation quantile (*improvement-based criterion*).

L’idée sous-jacente de ce type d’approche est, à chaque itération, de minimiser en moyenne et conditionnellement aux t observations précédentes, la variance du paramètre d’intérêt que l’on cherche à estimer conditionnellement aux t observations précédentes et au nouveau point que l’on souhaite ajouter.

La stratégie que nous proposons ici est une adaptation à l'estimation du quantile de la méthode SUR (Stepwise Uncertainty Reduction) proposée par [Bect et al., 2012] pour l'estimation de la probabilité $\mathbb{P}(Y \geq s)$, où s est un seuil donné. L'utilisation de la méthode SUR pour l'estimation d'un quantile a déjà été faite par [Arnaud et al., 2010] dans le cadre d'une application en dimension 1 à un modèle hydraulique.

4.3.1 Méthode SUR

Pour sélectionner le prochain point en lequel la fonction f va être évaluée, l'idée est d'utiliser un critère qui minimise la déviation au vrai paramètre d'intérêt $\theta(f)$ que l'on cherche à estimer. Ainsi, le $(t + 1)$ ème point à ajouter à l'ensemble des observations peut se définir comme suit :

$$x_{t+1} \in \arg \min_{x \in A} V_t(x) , \quad (4.17)$$

où A est une grille fine de \mathcal{A} et

$$V_t(x) = \int \text{Var}(\theta | \mathcal{F}_t^{(x,y)}) \varphi_{\mu_t(x), \sigma_t^2(x)}(y) dy , \quad (4.18)$$

avec $\mathcal{F}_t^{(x,y)} = \{(x_1, f(x_1)), \dots, (x_t, f(x_t)), (x, y)\}$, $\sigma_t^2(x) = k_t(x, x)$ et $\varphi_{\mu_t(x), \sigma_t^2(x)}$ est la densité de probabilité d'une variable aléatoire gaussienne de moyenne $\mu_t(x)$ et de variance $\sigma_t^2(x)$. Les étapes de l'algorithme de SUR sont les mêmes que celles de l'Algorithme 4, hormis les étapes de réduction de l'espace de recherche et de maximisation de σ_t^2 sur cet espace, qui sont évidemment remplacées par les étapes de calcul du critère (4.18) et sa minimisation.

Le critère (4.18) peut avoir une forme explicite dans le cas de certains paramètres d'intérêt (comme par exemple la probabilité $\mathbb{P}(Y \geq t)$ de dépasser un seuil t , voir [Chevalier et al., 2011]), mais pour l'estimation d'un α -quantile q_α de la distribution de Y , il faut avoir recours à des simulations de Monte-Carlo pour calculer une approximation de (4.18).

Plus précisément, après avoir évalué f en t points, il faut simuler N trajectoire du processus gaussien $\text{GP}(\mu_t, k_t)$. Pour chaque point $x \in A$ en lesquels la fonction f n'a pas encore été évaluée, il faut calculer les N distributions a posteriori du processus gaussien conditionnellement à l'ajout de x , ainsi que l'image de x par chacune de ces trajectoires. Puis il faut simuler N' trajectoires pour chacun de ces processus gaussiens conditionnels, afin de pouvoir estimer la variance empirique de l' α -quantile q_α ; la moyenne de ces N variances empiriques correspond à la valeur du critère (4.17) pour le point $x \in A$. C'est ce que nous décrivons dans l'Algorithme 6.

Illustration de la méthode SUR

Voici un exemple de recherche de point en appliquant la méthode SUR pour l'estimation du quantile à 95% d'une réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 1, avec une fonction de covariance gaussienne (fonction g_1 définie dans (3.17)). Ici on choisit de calculer le critère en réalisant $N \times N' = 50 \times 50$ tirages de Monte Carlo sur les trajectoires de processus gaussien.

Algorithm 6 Procédure pour l'estimation de q_α par la méthode SUR

Entrée : \mathcal{X} , une grille fine de $[0, 1]^d$, T_0 un petit nombre de points de \mathcal{X} où f est évaluée tels que $\{(X_1, f(X_1)), \dots, (X_{T_0}, f(X_{T_0}))\} = \mathcal{F}_{T_0}$ et $\mathcal{X}_0 = (X_1, \dots, X_{T_0})$.

Procédure

1. Evaluer la distribution a posteriori du processus gaussien noté ξ_{T_0} selon (3.6) et (3.7)
2. Evaluer l'estimation de q_α en utilisant le métamodèle μ_{T_0}
3. Evaluer le critère
 - (a) Simuler N trajectoires $\xi_{T_0}^{(1)}, \dots, \xi_{T_0}^{(N)}$ du processus gaussien ξ_{T_0}
 - (b) Pour chaque point x de la grille $\mathcal{X} / \mathcal{X}_0$ évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien $\xi_{T_0(x, \xi_{T_0}^i(x))}$, $i \in \{1, \dots, N\}$, conditionnellement à l'ajout de $(x, \xi_{T_0}^i(x))$ à \mathcal{F}_{T_0}
 - (c) Simuler N' trajectoires $\xi_{T_0(x, \xi_{T_0}^i(x))}^{(1)}, \dots, \xi_{T_0(x, \xi_{T_0}^i(x))}^{(N')}$ du processus gaussien $\xi_{T_0(x, \xi_{T_0}^i(x))}$, $i \in \{1, \dots, N\}$
 - (d) Pour chacune de ces N' trajectoires, estimer $\theta(\xi_{T_0(x, \xi_{T_0}^i(x))}^{(j)})$, $j \in \{1, \dots, N'\}$, et la variance empirique de q_α sur ces N' estimations notée $s_T^{(i)}(x)$
 - (e) Evaluer la moyenne des N variances empiriques de q_α : $V_T(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_T^{(i)}$ correspond à la valeur du critère pour les points x de la grille $x \in \mathcal{X} / \mathcal{X}_0$
 - (f) Répéter les étapes (c), (d), (e) pour chaque point x de la grille $x \in \mathcal{X} / \mathcal{X}_0$
4. Sélectionner le point x pour lequel $V_T(x)$ est minimal et évaluer f en ce point
5. Ajouter cette nouvelle observation à l'ensemble des observations
6. Répéter toutes les étapes jusqu'à atteindre le nombre maximal autorisé d'évaluations de f

Sortie Estimateur de q_α

Même si l'on obtient de bons résultats pour l'estimation du quantile, on peut voir dans la figure 4.3 que la convergence du critère est assez médiocre. Il faudrait augmenter le nombre de tirages de Monte Carlo, mais cela induit un allongement du temps nécessaire à l'ajout d'un point : on passe de 70 secondes environ avec $N \times N' = 50 \times 50$ à 920 secondes avec $N \times N' = 200 \times 200$, pour obtenir les résultats représentés dans la figure 4.4, qui ne sont pas encore parfaits.

4.3.2 Remarque : SUR “profond”

Comme nous l'avons fait remarquer précédemment, le critère SUR est proche d'un critère “EI” (“*expected improvement*”) de l'optimisation bayésienne dans le sens où le point que l'on ajoute à

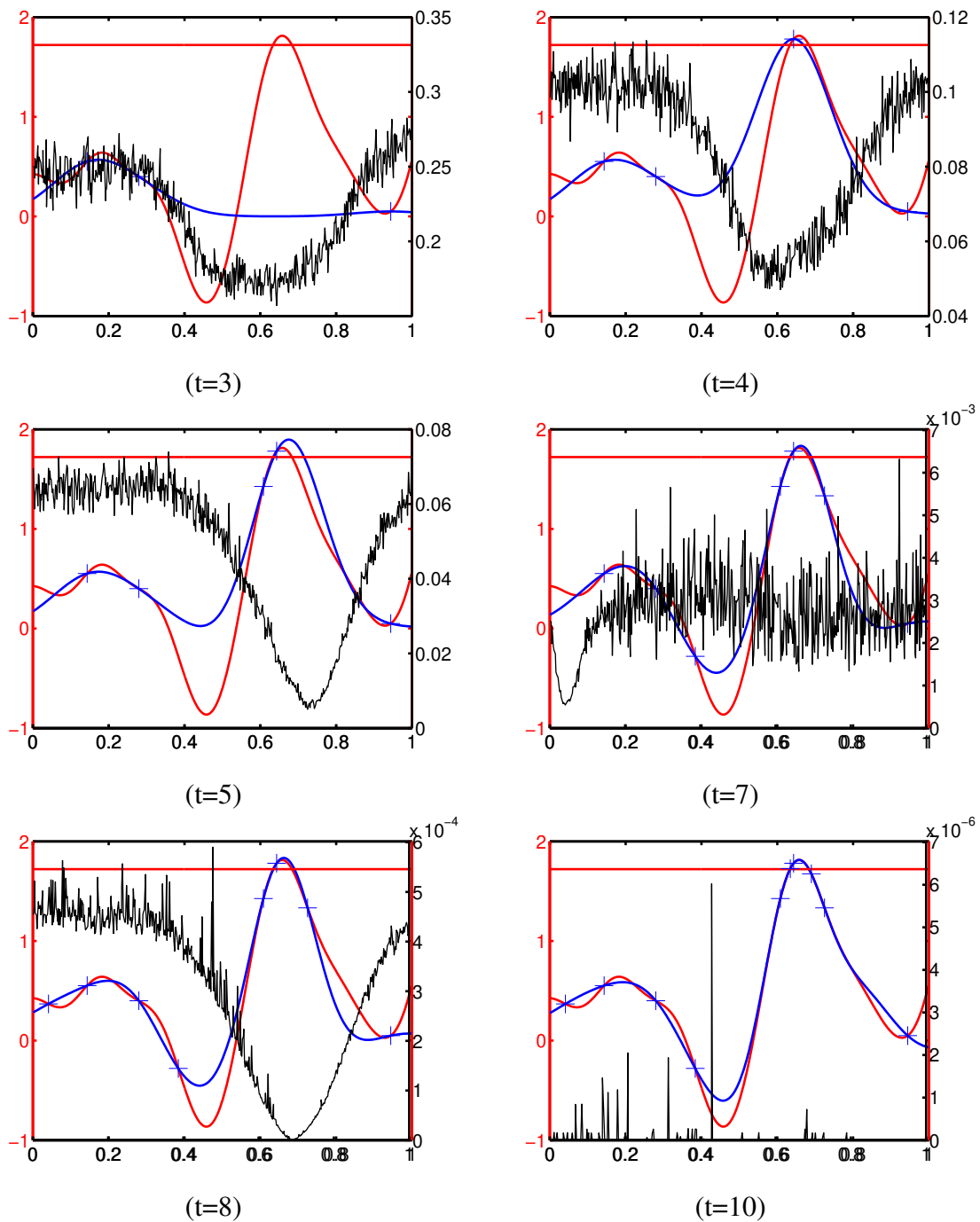


FIGURE 4.3 – SUR simple pas à pas, avec $N \times N' = 50 \times 50$; en rouge la fonction et le vrai quantile, en bleu μ_t , les croix bleues sont les observations et en noir le critère (échelle sur l'axe de gauche).

chaque itération est supposé être celui qui améliore le plus l'estimation de notre quantité d'inté-

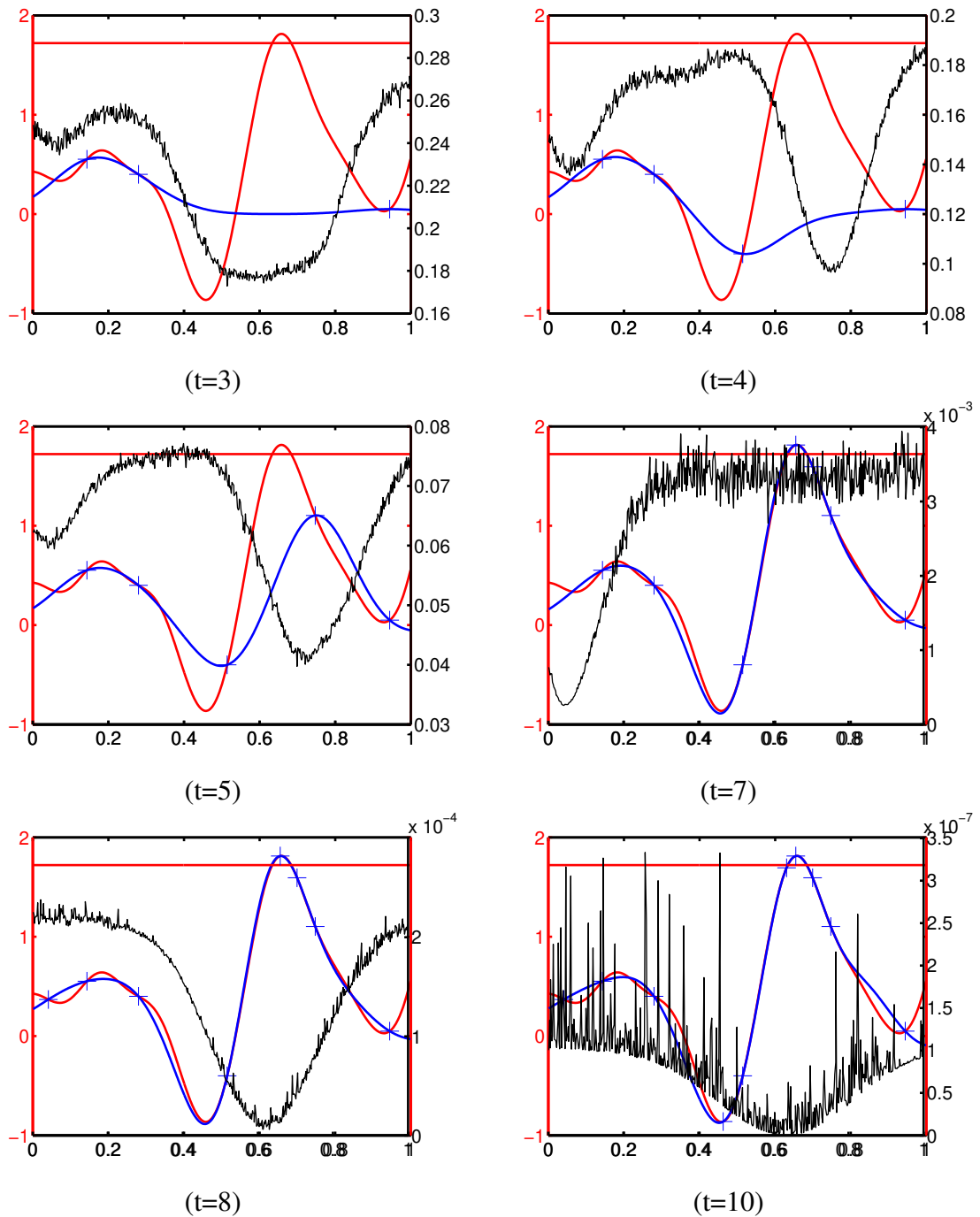


FIGURE 4.4 – SUR simple pas à pas, avec $N \times N' = 200 \times 200$; en rouge la fonction et le vrai quantile, en bleu μ_t , les croix bleues sont les observations et en noir le critère (échelle sur l'axe de gauche).

rêt, compte tenu des observations qui ont déjà été faites. Ainsi, on peut voir que le critère défini

dans (4.17) est très proche de l’une des fonctions d’acquisition “*improvement-based*” pour l’estimation du maximum de la fonction f décrite dans [Brochu et al., 2010] et qui avait été étudiée par [Mockus et al., 1978]. En effet, dans le cadre de la mise ne place de méthodes de planification séquentielle d’expériences pour la maximisation de f , on peut utiliser le critère suivant :

$$x_{t+1} \in \arg \min_{x \in A} \mathbb{E} (|f(x) - f(x^*)| \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t)) , \quad (4.19)$$

où $f(x) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t) \sim \mathcal{N}(\mu_t(x), \sigma_t^2(x))$ et $f(x^*)$ désigne le vrai maximum.

On peut appliquer une récursion sur le critère utilisé dans (4.19) pour choisir le point à ajouter : même si on ne réalise qu’une seule observation à la fois, on tient compte du fait que ce n’est pas le seul point qu’on va ajouter mais que d’autres suivront. Ainsi, si une fois que l’on a réalisé t observations, on prévoit d’en faire deux de plus, on peut choisir le $(t + 1)$ ième point tel que :

$$x_{t+1} \in \arg \min_{x \in A} \mathbb{E} \left(\min_{x' \in A} \mathbb{E} (|f(x') - f(x^*)| \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t), (x, f(x))) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t) \right) .$$

Cette idée peut facilement être transposée pour le critère SUR, et est d’autant plus séduisante qu’elle se détache des stratégies dites myopes, qui désignent le meilleur point où évaluer f compte tenu des observations précédentes, mais sans intégrer le fait que notre prochaine observation n’est pas la dernière, et que d’autres suivront. En effet, rien ne nous assure qu’une stratégie à horizon 1 nous conduira à élaborer un plan d’expériences satisfaisant compte tenu du budget d’observations qui nous est alloué.

Par conséquent, l’utilisation d’un critère qui tiendrait compte du nombre total d’évaluations possibles de f , ou, plus modestement, qui envisagerait une planification à un horizon supérieur à 1, pourrait s’avérer judicieuse. Cependant, plus on veut prévoir d’ajouter de points, plus il faut prévoir de tirages de Monte Carlo sur les trajectoires de processus gaussiens ; la méthode devient rapidement très coûteuse.

Nous avons tout de même essayé cet approche, pour notre problème d’estimation d’un α -quantile de $f(X)$. Pour cela, nous avons employé un algorithme de minimisation nommé CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy), élaboré par Hansen¹, qui est décrit et comparé dans [Hansen and Ostermeier, 2001] et [Hansen, 2006]. Cependant, après quelques essais sur des exemples simples, nous n’avons pas constaté d’amélioration des performances par rapport à la stratégie SUR que nous avons décrite au paragraphe précédent. Par conséquent nous ne retiendrons pas cette approche dans le chapitre 5 où nous comparons les différentes méthodes introduites au cours de ce chapitre sur des données simulées.

4.4 Adaptation de la méthode de Ranjan, Bingham et Michailidis

La méthode que nous présentons dans cette partie est une adaptation possible d’une méthode destinée à l’estimation d’un contour décrite dans [Ranjan et al., 2008], pour l’estimation d’un

¹<https://www.lri.fr/~hansen/cmaesintro.html>

quantile. La méthode de [Ranjan et al., 2008] est également une approche séquentielle, basée sur une modélisation de f par une trajectoire de processus gaussien, où f est une fonction inconnue, à valeurs réelles, et coûteuse à évaluer. La définition d'un contour est la suivante :

$$S(a) = \{x \in \mathcal{A} : f(x) = a\},$$

où $a \in \mathbb{R}$ est une valeur donnée et \mathcal{A} est défini dans (4.3). La méthode a donc pour objectif de sélectionner les points x de \mathcal{A} qui appartiennent à $S(a)$. Pour cela, on commence par définir la fonction $I_{a,t}$ (appelée "improvement function") pour t observations de f :

$$I_{a,\beta,t}(x) = \beta^2 \sigma_t^2(x) - \min\{(f(x) - a)^2, \beta^2 \sigma_t^2(x)\}, \quad (4.20)$$

où $\sigma_t(x)^2 = k_t(x, x)$ est défini dans (3.7) et β est une constante positive. Un point sera ajouté au plan d'expériences séquentiel s'il appartient à un voisinage $(a - \beta \sigma_t(x), a + \beta \sigma_t(x))$ du contour ; on remarque qu'un point choisi dans l'ensemble $\{x \in \mathcal{A} : f(x) = a\}$, où la variance du processus gaussien est la plus grande, contribuera à réduire l'incertitude sur f dans la zone du contour. Ce critère ne peut pas être utilisé tel quel, car f est inconnue ; cependant, compte tenu de notre a priori de processus gaussien, on sait que, étant donné un ensemble $\{y_1, \dots, y_t\}$ d'évaluations de f aux points $\{x_1, \dots, x_t\}$ tels que $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, $f(x) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t) \sim \mathcal{N}(\mu_t(x), \sigma_t^2(x))$, avec $\mu_t(x)$ défini dans (3.6) et $\sigma_t^2(x) = k_t(x, x)$ défini dans (3.7). Ainsi on peut définir l'espérance conditionnelle de $I_{a,\beta,t}$, appelée "expected improvement" et que nous notons $(EI)_{a,\beta,t}(x)$:

$$\begin{aligned} (EI)_{a,\beta,t}(x) &= [(\beta^2 - 1)\sigma_t^2(x) - (\mu_t(x) - a)^2] \times \left[\Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right] \\ &\quad + 2(\mu_t(x) - a)\sigma_t(x) \times \left[\phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right] \\ &\quad + \sigma_t^2(x) \left[\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta \right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta \right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right], \end{aligned} \quad (4.21)$$

où $\phi(\cdot)$ et Φ sont respectivement la densité et la fonction de répartition d'une loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$. Cette expression diffère de celle donnée dans l'article (voir [Ranjan et al., 2008, Equation (8)]), mais un erratum a été publié sur le site de Ranjan² pour corriger la formule. Une preuve de (4.21) est donnée dans la partie 4.5.

Comme nous l'avons dit précédemment, la méthode de Ranjan, Bingham et Michailidis permet de sélectionner des points x dans \mathcal{A} dont on espère que leur image par f est proche d'un niveau a . L'idée est donc d'adapter cette méthode pour qu'elle sélectionne des points tels que leur image par f est proche de l' α -quantile q_α que l'on souhaite estimer. Pour cela, il faut rechercher les points du contour $S(q_\alpha) = \{x \in \mathcal{A} : f(x) = q_\alpha\}$, avec q_α défini dans (4.1). Le problème est que q_α est inconnu. Une adaptation possible de la méthode de [Ranjan et al., 2008] consiste

²<http://www.acadiau.ca/~pranjan/>

donc à remplacer a dans (4.21) par l'estimateur du quantile $\hat{q}_{\alpha,t}$ défini dans (4.9). Ainsi, après t évaluations de f , le nouveau point x_{t+1} à ajouter à l'ensemble des t observations précédentes est tel que :

$$x_{t+1} \in \arg \max_{x \in \mathcal{A}} (EI)_{a,\beta,t}(x) , \quad (4.22)$$

où $(EI)_{a,\beta,t}(x)$ est défini dans (4.21). Le détail des étapes cette stratégie, que nous noterons désormais RBM, se trouve dans l'Algorithme 7.

Algorithm 7 RBM

Entrée : x_1, \dots, x_{t_1} un petit nombre de points de \mathcal{A} où f a été évaluée

Pour $t = t_1, t_1 + 1, \dots, T$

- Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien ainsi que $\sigma_t(x)^2$ en utilisant (3.6) et (3.7)
- Évaluer $\hat{q}_{\alpha,t}$ avec (4.9)
- Choisir x_{t+1} selon (4.22)
- Évaluer f en ce point : $y_{t+1} = f(x_{t+1})$
- Ajouter cette nouvelle observation à l'ensemble ; $t = t + 1$

Évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien et $\hat{q}_{\alpha,t}$ en utilisant (4.9).

Pour illustrer le déroulement de la méthode RBM, nous utilisons l'exemple de réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 1 avec un noyau gaussien (la fonction g_1 définie dans (3.17) et représentée dans la figure 3.1 (a)). Les résultats se trouvent dans la figure 4.5 et 4.6. Nous présentons deux exemples pas à pas de la méthode car nous avons utilisé les mêmes points de départ et changé la valeur du paramètre β . En effet, dans l'article [Ranjan et al., 2008], les auteurs ne donnent pas d'indication sur la façon de choisir ce paramètre, et, même si sur des applications réelles il va falloir fixer β en l'absence d'information sur la fonction, dans le cas d'un exemple analytique on peut essayer plusieurs valeurs de β afin de comprendre les effets de ce paramètre.

Nous commençons par fixer $\beta = 1$; les résultats sont représentés dans la figure 4.5. Les premiers points choisis reflètent une phase d'exploration de l'algorithme, car ils sont répartis sur tout l'ensemble de recherche. Puis, à partir du huitième point ajouté ($t = 8$), les suivants sont sélectionnés majoritairement dans la zone du quantile, c'est la phase d'exploitation.

Considérons maintenant le cas $\beta = 10$. Compte tenu de l'expression du critère (4.21), augmenter la valeur de β aura pour conséquence d'augmenter le poids de la variance $\sigma_t^2(x)$ du processus gaussien dans le premier membre de la somme. L'incertitude sur la fonction sera donc prédominante dans le critère ; c'est ce que l'on observe dans la figure 4.6, où le critère suit exactement la forme des variations de σ_t . Par conséquent, la méthode prendra plus d'observations dans un objectif d'exploration. C'est bien ce que l'on observe dans la figure 4.6 avec des points

répartis sur tout l'ensemble de recherche et pas de concentration particulière dans la zone du quantile après 11 points ajoutés. Nous rappelons que nous avons bien utilisé la même fonction et les mêmes points de départ pour les deux applications, mais que sur les figures 4.5 et 4.6 il faut faire attention à l'échelle, car dans le cas $\beta = 10$ les bornes $(a - \beta\sigma_t(x), a + \beta\sigma_t(x))$ sont très grandes par rapport aux valeurs de la fonction.

Finalement, même si nous avons pu voir les effets de ce paramètre, il reste difficile de savoir comment choisir β en pratique. Choisir un β grand par rapport à la valeur de la quantité d'intérêt de la fonction f que l'on souhaite estimer entraînera plus d'observations dédiées à l'exploration de la zone de recherche, l'incertitude étant plus grande. Mais pour cela il semble nécessaire d'avoir une idée des valeurs que peut prendre la fonction f avant de lancer la méthode, ce qui ne sera pas forcément le cas dans le cadre d'une application à des données réelles.

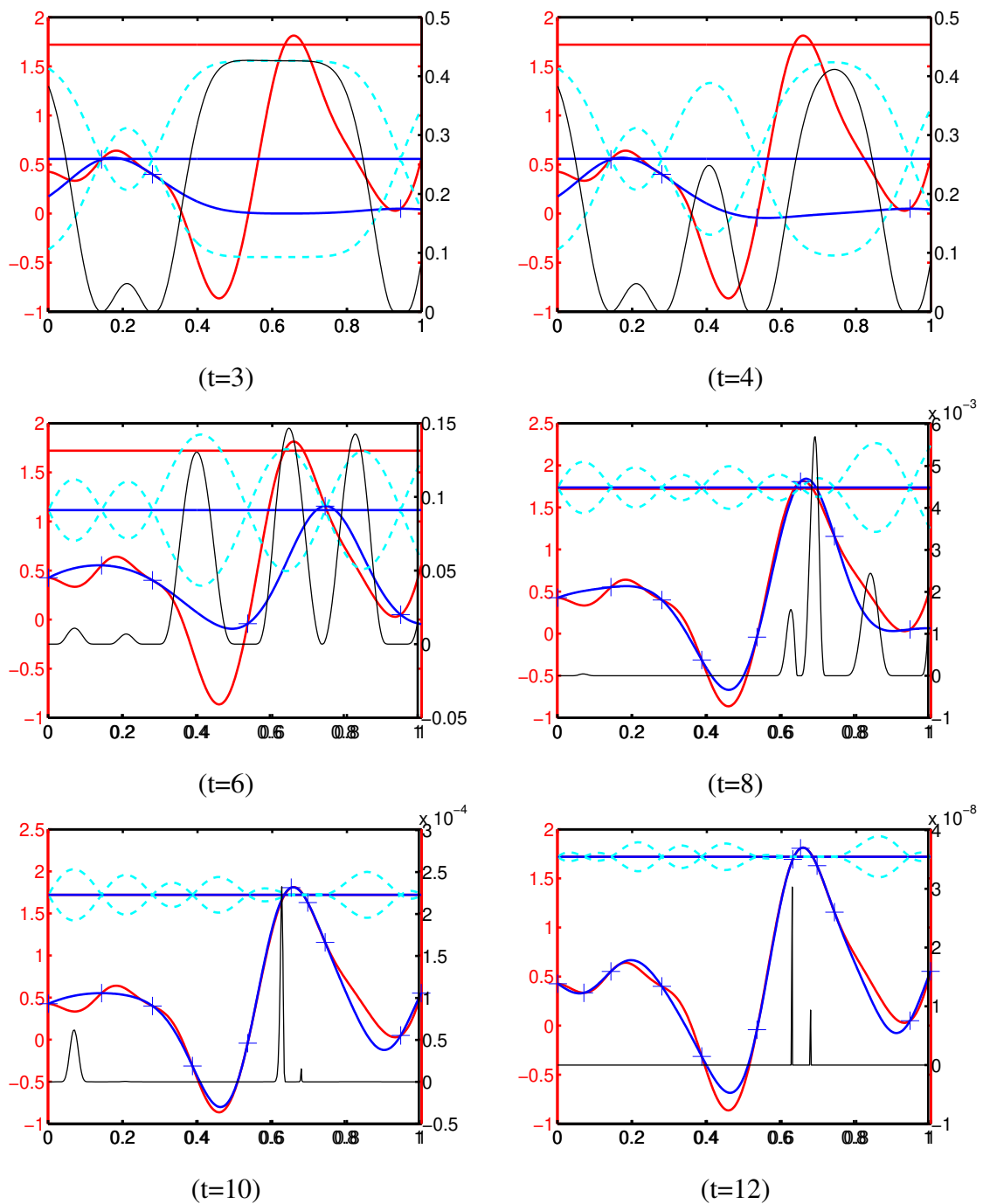


FIGURE 4.5 – Estimation avec la méthode de Ranjan, Bingham et Michailidis pour $\beta = 1$; en rouge la fonction et le vrai quantile, en bleu μ_t , les croix bleues sont les observations, en cyan l’enveloppe de confiance et en noir le critère (échelle sur l’axe de gauche).

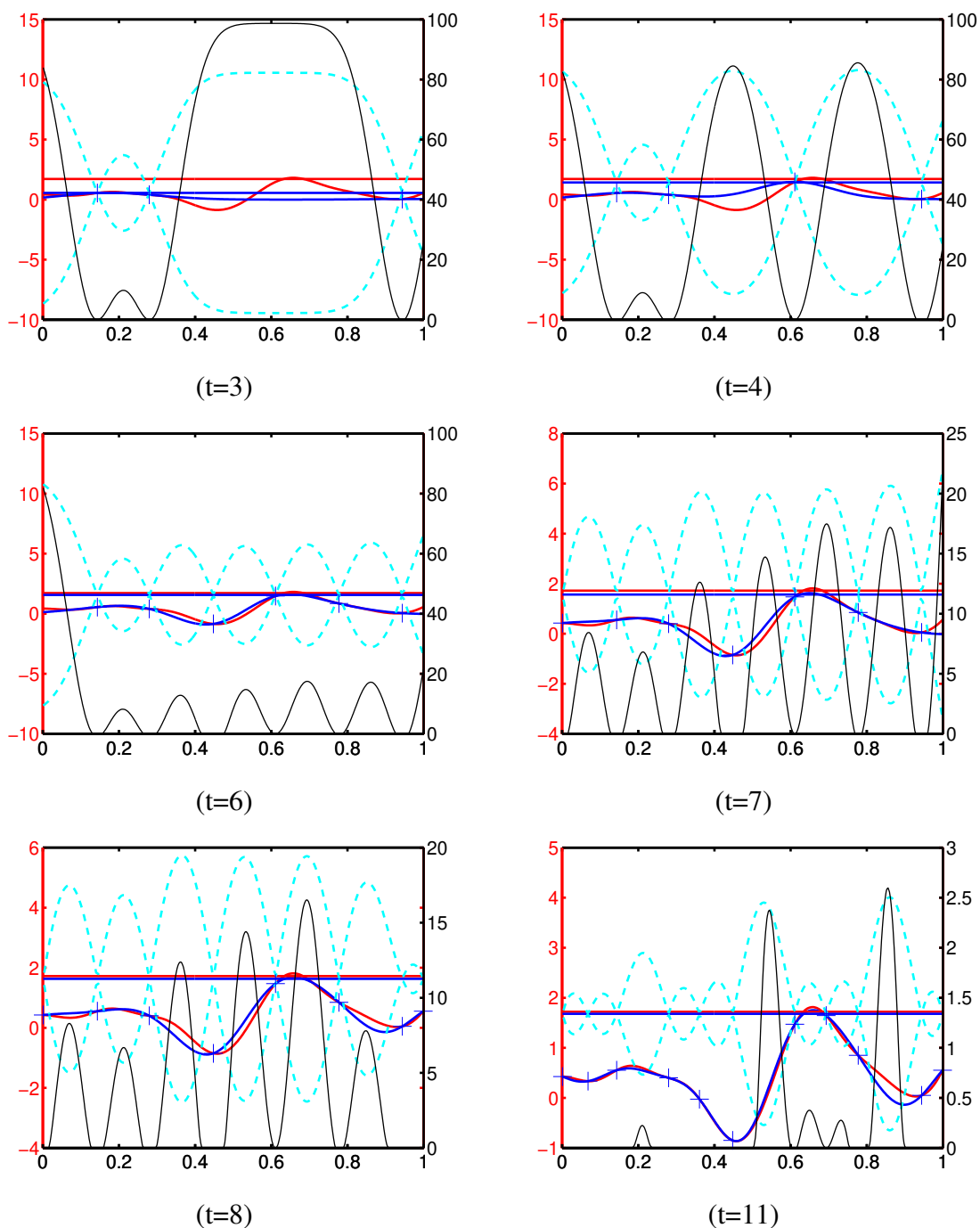


FIGURE 4.6 – Estimation avec la méthode de Ranjan, Bingham et Michailidis pour $\beta = 10$; en rouge la fonction et le vrai quantile, en bleu μ_t , les croix bleues sont les observations, en cyan l’enveloppe de confiance et en noir le critère (échelle sur l’axe de gauche).

4.5 Preuves

Commençons par un lemme venant de [Srinivas et al., 2012] :

Lemme 2.1. [Srinivas et al., 2012, Lemma 5.1] *Pour tout sous-ensemble A de \mathcal{A} , pour tout entier t et pour tout $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ deux-à-deux distincts donnés, étant donné $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ réalisation d'une trajectoire d'un GP(0, $k(\cdot, \cdot)$), pour tout δ dans $(0, 1)$, on a*

$$\mathbb{P}\left(\forall x \in A, \forall t \geq 1 : f(x) \in [\mu_t^L(x); \mu_t^U(x)]\right) \geq 1 - \delta, \quad (4.23)$$

avec $\mu_t^L(x)$ et $\mu_t^U(x)$ sont définis dans (4.5).

La preuve du Lemme 2.1 est donnée dans [Srinivas et al., 2012], mais dans un souci d'exhaustivité, nous la reproduisons ici.

Preuve du Lemme 2.1. Soient $t \geq 1$ et $x \in A$ fixés. Dans le cas d'observations non bruitées, étant donné un ensemble $\{y_1, \dots, y_t\}$ d'évaluations de f aux points $\{x_1, \dots, x_t\}$ tel que $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, d'après les hypothèse sur f du Lemme 2.1, on a :

$$f(x) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t) \sim \mathcal{N}\left(\mu_t(x), \sigma_t^2(x)\right), \quad (4.24)$$

avec $\mu_t(x)$ défini dans (3.6) et $\sigma_t^2(x) = k_t(x, x)$ défini dans (3.7). Or, si Z est une variable aléatoire telle que $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$, pour tout $c > 0$ il vient

$$\mathbb{P}(Z > c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_c^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}r^2} dr = \frac{e^{-\frac{1}{2}c^2}}{\sqrt{2\pi}} \int_c^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}(r-c)^2 - c(r-c)} dr.$$

Pour $r \geq c > 0$, $e^{-c(r-c)} \leq 1$, on a donc

$$\mathbb{P}(Z > c) \leq \frac{e^{-\frac{1}{2}c^2}}{\sqrt{2\pi}} \int_c^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}(r-c)^2} dr = e^{-\frac{1}{2}c^2} \mathbb{P}(Z > 0) = \frac{e^{-\frac{1}{2}c^2}}{2}.$$

Ainsi, selon (4.24), $\frac{f(x) - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} \sim \mathcal{N}(0, 1)$, et si on pose $c = \sqrt{\beta_t}$ on peut écrire

$$\mathbb{P}\left(|f(x) - \mu_t(x)| > \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t)\right) \leq e^{-\frac{\beta_t}{2}}.$$

Or on sait que, si $(B_n, n \geq 1)$ est une suite d'évènements d'un espace de probabilité, $\mathbb{P}(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n) \leq \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(B_n)$; ainsi, pour tout x dans A

$$\mathbb{P}\left(\forall x \in A : |f(x) - \mu_t(x)| \leq \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) \mid (x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t)\right) \geq 1 - |A|e^{-\frac{\beta_t}{2}},$$

où $|A|$ est le cardinal de A . En prenant $|A|e^{-\frac{\beta_t}{2}} = \delta \frac{6}{\pi^2 t^2}$ (on rappelle que $\sum_{t=1}^{\infty} \frac{1}{t^2} = \frac{\pi^2}{6}$), pour tout t dans \mathbb{N}^* , on obtient (4.23), ce qui conclut la preuve du Lemme 2.1. \square

Preuve de la Proposition 2.3. D'après le Lemme 2.1, avec probabilité supérieure à $(1-\delta)$, quelque soit $A = \{x_1, \dots, x_m\}$ sous-ensemble fini, quelque soit $t \in \mathbb{N}^*$ et quelque soient $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ deux-à-deux distincts, on a pour tout x de A

$$\mu_t^L(x) \leq f(x) \leq \mu_t^U(x) ,$$

où $\mu_t^L(x)$ et $\mu_t^U(x)$ sont définis dans (4.5). Ainsi, pour tout $q \in \mathbb{R}$,

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^U(x_i) \leq q\}} \leq \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{f(x_i) \leq q\}} \leq \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) \leq q\}} . \quad (4.25)$$

En particulier, pour $q = \hat{q}_{\alpha,t}^U$ dans (4.25) et en appliquant (4.7), il vient

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{f(x_i) \leq \hat{q}_{\alpha,t}^U\}} \geq \alpha .$$

Ainsi, d'après (4.2), on obtient l'inégalité $\tilde{q}_\alpha \leq \hat{q}_{\alpha,t}^U$. D'autre part, si on prend $q = \tilde{q}_\alpha$ dans (4.25), et d'après (4.2), il vient

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) \leq \tilde{q}_\alpha\}} \geq \alpha .$$

Ainsi, d'après (4.7), on obtient l'inégalité $\hat{q}_{\alpha,t}^L \leq \tilde{q}_\alpha$, ce qui conclut la preuve de la Proposition 2.3. \square

Preuve de la Proposition 2.4. Montrons au préalable que quelque soit $t \in \mathbb{N}^*$ et quelque soient $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ deux-à-deux distincts,

$$\hat{q}_{\alpha,t} \leq \hat{q}_{\alpha,t}^L + \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) . \quad (4.26)$$

D'après (4.7), pour tout $t \geq 1$,

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L\}} < 1 - \alpha .$$

Par définition de $U_{\alpha,t}$ donnée dans (4.8), il vient

$$\frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L\}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^L(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L\}} < 1 - \alpha .$$

Comme, par définition, $\mu_t^L(x_i) = \mu_t(x_i) - \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x_i)$, on obtient que

$$\frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} \leq \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L + \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x_i)\}} < 1 - \alpha .$$

Par définition de $U_{\alpha,t}$ donnée dans (4.8), il vient

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} = \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}^L + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} < 1 - \alpha .$$

D'après (4.9), on peut en déduire l'inégalité (4.26). D'après la Proposition 2.3, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, on en déduit que quelque soit $t \in \mathbb{N}^*$ et quelque soient $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ deux-à-deux distincts,

$$\hat{q}_{\alpha,t} \leq \tilde{q}_{\alpha} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) . \quad (4.27)$$

Montrons à présent que pour tout $t \geq 1$,

$$\hat{q}_{\alpha,t}^U \leq \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) . \quad (4.28)$$

Comme pour tout $t \geq 1$, $\mu_t^L(x) \leq \mu_t(x) \leq \mu_t^U(x)$, en utilisant les mêmes arguments que ceux de la Proposition 2.3 on en déduit que $\hat{q}_{\alpha,t}^L \leq \hat{q}_{\alpha,t} \leq \hat{q}_{\alpha,t}^U$, pour tout $t \geq 1$. Ainsi, par définition de $U_{\alpha,t}$ donnée dans (4.8), on en déduit que

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{1}_{\{\mu_t^U(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} = \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t^U(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} . \quad (4.29)$$

Comme $\mu_t^U(x) = \mu_t(x) + \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x)$,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t^U(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} \\ & \leq \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x_i \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x_i)\}} \\ & = \frac{1}{m} \sum_{\substack{1 \leq i \leq m \\ x_i \in \bar{U}_{\alpha,t}}} \mathbb{1}_{\{\mu_t(x_i) > \hat{q}_{\alpha,t}\}} < 1 - \alpha . \end{aligned}$$

D'après (4.29) et (4.7), on peut en déduire l'inégalité (4.28). D'après la Proposition 2.3, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, on en déduit que pour tout $t \geq 1$,

$$\tilde{q}_{\alpha} \leq \hat{q}_{\alpha,t} + \sqrt{\beta_t} \sup_{x \in U_{\alpha,t}} \sigma_t(x) . \quad (4.30)$$

En utilisant (4.27) et (4.30), on obtient (4.10) ce qui conclut la preuve de la Proposition 2.4. \square

Preuve de la Proposition 2.5. D'après (4.23), avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, quel que soit le sous ensemble $A = \{x_1, \dots, x_m\}$, quelque soit $t \in \mathbb{N}^*$ et quelque soient $\{x_1, \dots, x_t\} \subset A$ deux-à-deux distincts, pour tout x dans A , on a

$$\mu_t^L(x) \leq f(x) \leq \mu_t^U(x) ,$$

où $\mu_t^L(x)$ et $\mu_t^U(x)$ sont définis dans (4.5). Ainsi, avec probabilité supérieure à $(1 - \delta)$, par définition de $\mu_T^U(x)$ et $\mu_T^L(x)$,

$$f(x) - \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) \leq \mu_t(x) \leq f(x) + \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x), \quad (4.31)$$

où β_t est défini dans (4.6). Comme, pour tout x dans $U_{\alpha,t}$, on a

$$\mu_t(x) + \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x) \geq \hat{q}_{\alpha,t}^L,$$

on en déduit que, d'après (4.31), pour tout x dans $U_{\alpha,t}$,

$$\hat{q}_{\alpha,t}^L \leq f(x) + 2\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x),$$

ce qui nous donne, en appliquant (4.26) et (4.30), la première inégalité de (4.11). Comme, pour tout x dans $L_{\alpha,t}$, on a

$$\mu_t(x) \leq \hat{q}_{\alpha,t}^U + \sqrt{\beta_t} \sigma_t(x),$$

on en déduit que, d'après (4.31) pour tout x dans $L_{\alpha,t}$,

$$\hat{q}_{\alpha,t}^U \geq f(x) - 2\sqrt{\beta_t} \sigma_t(x),$$

ce qui nous donne, en appliquant (4.26) et (4.27), la première inégalité de (4.11), et conclut la preuve de la Proposition 2.5. \square

Preuve de l'équation (4.21). Soient $a \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}$, $t \geq 1$ et $x \in \mathcal{A}$ fixés. D'après (4.20) on peut écrire l'espérance conditionnelle de $I_{a,\beta,t}(x)$ telle que

$$(EI)_{a,\beta,t}(x) = \begin{cases} \beta^2 \sigma_t^2(x) - (f(x) - a)^2 & \text{si } f(x) \in (a - \beta \sigma_t(x), a + \beta \sigma_t(x)) \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

D'après (4.24) on a

$$(EI)_{a,\beta,t}(x) = \beta^2 \sigma_t^2(x) \int_{a-\beta \sigma_t(x)}^{a+\beta \sigma_t(x)} \frac{1}{\sqrt{2\pi \sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy \quad (4.32)$$

$$- \int_{a-\beta \sigma_t(x)}^{a+\beta \sigma_t(x)} (y - a)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi \sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy \quad (4.33)$$

Considérons le premier membre de la somme ; en effectuant le changement de variable $u = \frac{y - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)}$, l'intégrale (4.32) se réécrit

$$\beta^2 \sigma_t^2(x) \int_{\frac{a-\mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta}^{\frac{a-\mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right) du = \beta^2 \sigma_t^2(x) \left[\Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right], \quad (4.34)$$

où $\Phi(\cdot)$ désigne la fonction de répartition d'une loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$.

Quant au second membre (4.33), on peut le réécrire

$$\begin{aligned} & \int_{a-\beta\sigma_t(x)}^{a+\beta\sigma_t(x)} (y - \mu_t(x) + \mu_t(x) - a)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy \\ &= \int_{a-\beta\sigma_t(x)}^{a+\beta\sigma_t(x)} (y - \mu_t(x))^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$+ (\mu_t(x) - a)^2 \int_{a-\beta\sigma_t(x)}^{a+\beta\sigma_t(x)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy \quad (4.36)$$

$$+ 2(\mu_t(x) - a) \times \int_{a-\beta\sigma_t(x)}^{a+\beta\sigma_t(x)} (y - \mu_t(x)) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) dy. \quad (4.37)$$

En procédant comme pour (4.34), le membre (4.36) s'écrit

$$(\mu_t(x) - a)^2 \left[\Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right]. \quad (4.38)$$

On peut intégrer (4.37) tel que :

$$\begin{aligned} & 2(\mu_t(x) - a) \left[-\frac{\sigma_t^2(x)}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2(x)}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_t^2(x)}(y - \mu_t(x))^2\right) \right]_{a-\beta\sigma_t(x)}^{a+\beta\sigma_t(x)} \\ &= -2(\mu_t(x) - a)\sigma_t(x) \left[\phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right], \end{aligned} \quad (4.39)$$

où $\phi(\cdot)$ est la densité de probabilité d'une loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$.

Pour le calcul du membre (4.35), commençons par le même changement de variable que pour (4.34), soit $u = \frac{y - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)}$, puis procédons à une intégration par parties :

$$\begin{aligned} & \sigma_t^2(x) \int_{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta}^{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta} u^2 \phi(u) du \\ &= \sigma_t^2(x) \left\{ [-u\phi(u)]_{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta}^{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta} + \int_{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta}^{\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta} \phi(u) du \right\} \\ &= -\sigma_t^2(x) \left\{ \left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right\} \\ & \quad + \sigma_t^2(x) \left[\Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

La somme de (4.34) et de l'opposé de (4.38), (4.39) et (4.40) permet de retrouver la formule

(4.21),

$$\begin{aligned}(EI)_{a,\beta,t}(x) &= [(\beta^2 - 1)\sigma_t^2(x) - (\mu_t(x) - a)^2] \times \left[\Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \Phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right] \\ &\quad + 2(\mu_t(x) - a)\sigma_t(x) \times \left[\phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right] \\ &\quad + \sigma_t^2(x) \left[\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} + \beta\right) - \left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \phi\left(\frac{a - \mu_t(x)}{\sigma_t(x)} - \beta\right) \right]\end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve de (4.21).

□

Chapitre 5

Comparaison des méthodes sur des exemples numériques

Résumé

Dans ce chapitre, nous allons comparer les performances des méthodes que nous avons présentées au cours du chapitre précédent pour l'estimation d'un quantile à 95% de la distribution de $Y = f(X)$. Ici, X suit une loi uniforme sur $[0, 1]^d$ pour $d = 1, 2, 3$, et f est une réalisation d'une trajectoire de processus gaussien. Nous comparerons GPS et GPS+ à SUR dans la partie 5.2, et à la méthode RBM (*Ranjan Bingham Michailidis*, adaptée de [Ranjan et al., 2008]) dans la partie 5.3. Enfin, dans la partie 5.4, nous aborderons la question de l'estimation des hyperparamètres intervenant dans la définition de la structure de covariance du processus gaussien, ce qui est certes en marge des comparaisons précédentes, mais important lorsque l'on se destine à réaliser des applications réelles pour lesquelles on ne peut présumer d'aucune valeur pour ces hyperparamètres.

5.1 Introduction

Dans cette partie, afin de comparer les méthodes décrites dans le chapitre 4, nous allons les appliquer à l'estimation du quantile à 95% de la distribution de $Y = f(\mathbf{X})$, où \mathbf{X} suit une loi uniforme sur $\mathcal{A} = [0, 1]^d$ pour $d = 1, 2, 3$, et f est la réalisation d'une trajectoire d'un processus gaussien de moyenne nulle pour lequel nous emploierons différentes fonctions de covariance. Ainsi, pour $d = 1$, nous utiliserons les fonctions g_1 et g_3 , définies dans (3.17) et (3.19), qui sont respectivement des réalisations de trajectoires de processus gaussien de moyenne nulle avec une fonction de covariance gaussienne (définie dans (3.8), avec $\ell = 0.1$) et un noyau de Matérn (de paramètre $\nu = 1/2$, défini dans (3.16), avec $\ell = 0.1$). Pour $d = 2$, nous prendrons l'exemple de la fonction g_2 , définie dans (3.18), qui est la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien dont la fonction de covariance est le noyau gaussien défini dans (3.9), avec $\ell_1 = \ell_2 = 0.1$. Nous utiliserons également une réalisation de trajectoire de processus gaussien avec une fonction de covariance gaussienne pour $d = 3$, avec $\ell_1 = \ell_2 = \ell_3 = 0.1$.

Dans la suite, nous allons noter $\tilde{Q}_{0.95}$ l'estimateur du quantile à 95% donné par :

$$\tilde{Q}_{0.95} = (f(\mathcal{X}_M))_{(\lceil M \times 0.95 \rceil)} , \quad (5.1)$$

où $f(\mathcal{X}_M) = \{f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_M)\}$, $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M$ étant M réalisations du vecteur aléatoire \mathbf{X} . Dans (5.1), $(f(\mathcal{X}_M))_{(i)}$ désigne la i ème plus petite valeur de l'ensemble $f(\mathcal{X}_M)$ et $\lceil x \rceil$ l'entier le plus proche supérieur ou égal à x . L'estimateur du quantile calculé à partir de μ_t est défini par :

$$\hat{q}_{0.95,t} = (\mu_t(\mathcal{X}_p))_{(\lceil p \times 0.95 \rceil)} , \quad (5.2)$$

où $\mu_t(\mathcal{X}_p) = \{\mu_t(\tilde{x}_1), \dots, \mu_t(\tilde{x}_p)\}$ et $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_p$ étant p réalisations du vecteur aléatoire \mathbf{X} . Dans les exemples qui vont suivre, p sera largement inférieur à M , pour que les calculs ne soient pas trop coûteux. Remarquons ici que nous n'utilisons pas exactement la même définition que celle de (4.9), même si pour les besoins des méthodes définies sur une grille telles que GPS ou SUR, nous allons également définir des points $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\} = A$ comme dans (4.3). Cependant, comme nous allons comparer les méthodes avec grille et les méthodes sans grille, il apparaît nécessaire de définir l'estimateur (5.2), qui sera donc le même pour toutes les méthodes ; en effet, nous ne souhaitons pas "désavantager" celles qui choisissent des points hors de la grille sous-jacente A et pour lesquelles l'estimation de la moyenne du processus gaussien en les points de la grille ($\mu_t(\mathbf{x}_i)$, $i = 1, \dots, m$) ne sera jamais (ou presque) égale à la vraie valeur de la fonction en ces points ($f(\mathbf{x}_i)$, $i = 1, \dots, m$), alors que, avec notre modèle (3.5), dans le cas d'une méthode qui utilise une grille, $\mu_t(\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i)$ si \mathbf{x}_i est observé.

La quantité $\tilde{Q}_{0.95}$ est utile pour évaluer les performances de nos méthodologies en évaluant les erreurs relatives, que l'on définit pour un ensemble de t observations par

$$\frac{|\tilde{Q}_{0.95} - \hat{q}_{0.95,t}|}{\tilde{Q}_{0.95}} . \quad (5.3)$$

Ainsi, en faisant ce choix, les performances de nos stratégies sont comparées non pas à la valeur de l'estimateur $\tilde{q}_{0.95}$ défini dans (4.2), mais à $\tilde{Q}_{0.95}$, ce qui constitue un objectif plus difficile à

atteindre ; en effet, dans les exemples qui vont suivre, nous choisissons de prendre $M = 10^5$ alors que m , qui intervient dans la définition de $\tilde{Q}_{0.95}$ vaut au maximum 1000. Pour les fonctions g_1 , g_2 et g_3 , nous obtenons respectivement pour $\tilde{Q}_{0.95}$ les valeurs de 1.7211, 1.7543 et 1.1417. Pour la trajectoire de processus gaussien en dimension $d = 3$, nous avons évalué $\tilde{Q}_{0.95}$ à 1.7109.

5.2 Comparaison des méthodes GPS et SUR

5.2.1 Exemples en dimensions $d = 1$ et $d = 2$

La comparaison entre GPS, GPS+, et SUR pour l'estimation d'un quantile à 95% est réalisée en utilisant des tirages de Monte Carlo sur le choix de la grille A (définie dans (4.3)) et de l'ensemble initial d'observations pour les trois fonctions g_1 , g_2 et g_3 , comme nous l'avons annoncé au début de ce chapitre. Les résultats sont représentés dans la figure 5.1 à travers la moyenne des erreurs relatives calculées à chaque fois qu'un nouveau point est ajouté à l'ensemble des observations.

Pour la fonction g_1 , on effectue 100 tirages de Monte Carlo ; les résultats sont représentés dans la figure 5.1 (a). La méthode SUR donne de meilleurs résultats que nos deux stratégies, dont les performances sont équivalentes : une erreur relative inférieure à 10% est atteinte, en moyenne, après 4 évaluations de g_1 en des points sélectionnés par la méthode SUR, alors que pour GPS et GPS+ il faut deux évaluations supplémentaires pour atteindre le même pourcentage d'erreur.

Les résultats sont différents lorsque l'on utilise la fonction g_3 , qui est, rappelons-le, la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien pour un noyau de Matérn de paramètre $\nu = 1/2$. Certes, les performances des trois algorithmes sont les mêmes jusqu'à 100 itérations, soit le nombre de points contenus dans la grille sous-jacente A : après 100 itérations on atteint une erreur relative moyenne de 4%. Cependant, avec la stratégie GPS+ qui nous permet d'ajouter des points de façon adaptative dans la grille initiale, on peut atteindre une erreur de 1%.

Pour ces exemples unidimensionnels, nous avons fixé le nombre N de tirages de Monte Carlo sur les trajectoires des processus gaussiens et des processus gaussiens conditionnels pour évaluer le critère SUR à 10. Comme nous l'avons vu au cours du chapitre 4, partie 4.3, une valeur aussi faible ne garantit pas une bonne convergence du critère, mais comme le calcul est plus rapide et qu'en pratique on observe de bons résultats, ce compromis est pour le moment acceptable. Cependant, lorsque la dimension augmente, la méthode SUR n'est plus compétitive pour $N = 10$, comme on peut l'observer dans la figure 5.1 (b) lorsque cette stratégie est appliquée à la fonction g_2 (réalisation d'une trajectoire de processus gaussien bidimensionnelle avec un noyau exponentiel). En effet, les moyennes des erreurs relatives sur l'estimation du quantile calculées pour 60 tirages de Monte Carlo montrent qu'il faut choisir $N = 50$ pour que la méthode SUR permette d'obtenir des erreurs relatives plus faibles en moyenne que pour les autres méthodes.

5.2.2 Exemple en dimension $d = 3$

Les stratégies que nous avons mises en place pour l'estimation d'un quantile doivent pouvoir être appliquées à des problèmes de dimension supérieure à 1 ou 2. Comme nous l'avons déjà

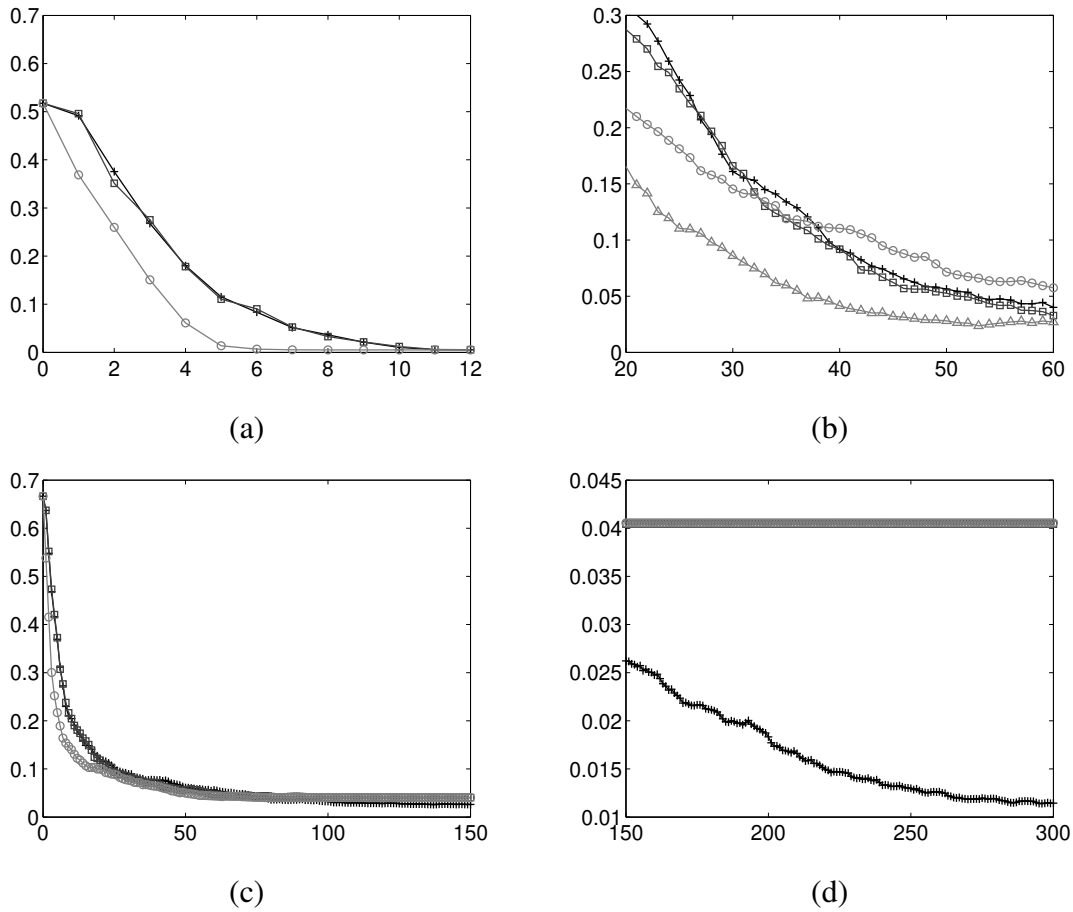


FIGURE 5.1 – Moyenne des erreurs relatives à chaque itération. GPS (carrés noirs), GPS+ (croix noires), SUR avec $N = 10$ (cercles gris clair) appliquées pour la recherche du quantile à 95% de (a) la fonction g_1 , (c) et (d) la fonction g_3 , (b) la fonction g_2 et l'application de SUR avec $N = 50$ (triangles gris clairs).

pressenti avec les exemples précédent, la stratégie SUR ne semble pas être adaptée pour cela, et cet exemple d'application à l'estimation du quantile à 95% d'une réalisation d'une trajectoire de processus gaussien de moyenne nulle avec une fonction de covariance gaussienne définie dans (3.9) avec $d = 3$ et $\ell = 0.1$ va nous le confirmer.

Comme nous l'avons fait dans le paragraphe 5.2.1, nous comparons les performances des trois stratégies sur ce problème, en commençant avec les mêmes deux points choisis au hasard dans la grille sous-jacente A de cardinal 1000. Ici les estimateurs du quantile seront comparés à la valeur $\tilde{Q}_{0.95} = 1.7109$ obtenue pour $M = 10^5$.

dans la figure 5.2 (a), les estimations de $\hat{q}_{0.95,t}^L$ et $\hat{q}_{0.95,t}^U$ sont représentées pour la méthode GPS+. On peut voir que ces quantiles convergent vers $\tilde{Q}_{0.95}$ quand le nombre d'observations augmente, mais pour avoir un encadrement très précis il faut continuer d'ajouter des observations en dehors de la grille A.

En utilisant un ordinateur avec la configuration suivante : RAM 12 GB, CPU 3.2 GHz, pour la stratégie SUR avec $N = 50$ il faut environ 415 secondes pour ajouter seulement un point au plan d'expériences. Par conséquent, obtenir 500 itérations de la méthode SUR a nécessité plus de deux jours (environ 55 heures). Réaliser des tirages de Monte Carlo sur la grille A et les points de départ comme nous l'avons fait précédemment devient inenvisageable ici, car il nous faudrait par exemple trois mois pour 50 réplifications de Monte Carlo. Par ailleurs, pour la stratégie GPS, en utilisant le même ordinateur, l'ajout d'un point ne prend que 0.3 seconds.

Les erreurs relatives obtenues en appliquant les méthodes SUR, GPS et GPS+ sont représentées dans la figure 5.2 (b) pour un seul choix au hasard de la grille A. Sur cette figure, on peut voir que GPS et GPS+ permettent d'obtenir de meilleurs résultats que SUR. Comme nous l'avons vu au paragraphe 5.2.1, augmenter le nombre N de Monte Carlo pour calculer le critère (4.18) serait certainement le moyen d'améliorer ces résultats. Néanmoins, nous avons également fait remarquer plusieurs fois que l'augmentation de la valeur de N induit un allongement important du temps de calcul du critère, qui est déjà coûteux dans ce cas. Par conséquent, pour nos applications aux données réelles, compte tenu de ces temps de calcul prohibitifs pour la méthode SUR, nous allons renoncer à utiliser cette stratégie.

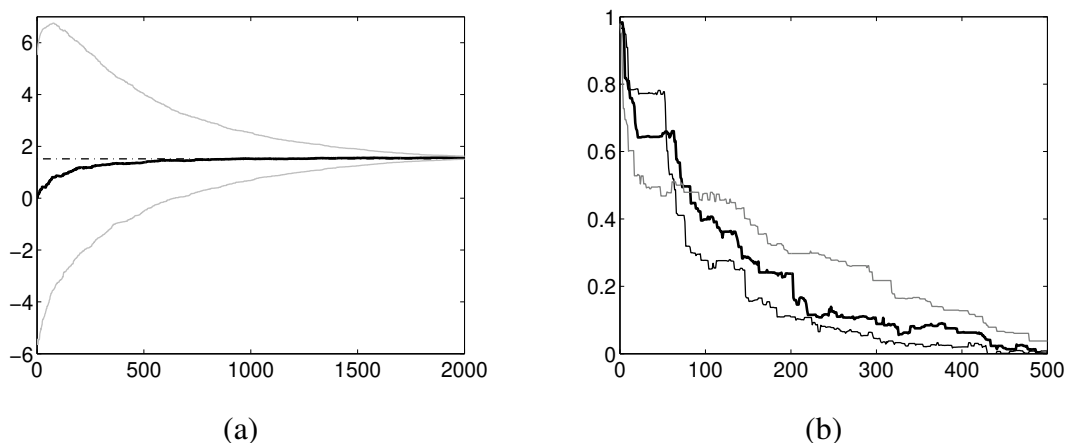


FIGURE 5.2 – (a) Quantiles estimés avec la méthode GPS+ à chaque itération : $\hat{q}_{0.95,t}$ (trait noir gras), $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (en haut et en bas, trait gris clair), et $\tilde{Q}_{0.95}$ (trait '-' noir); (b) Erreurs relatives à chaque itération pour GPS (trait noir), GPS+ (trait noir gras) et SUR (trait gris clair) appliquées à la réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 3, avec un noyau exponentiel.

5.3 Comparaison des méthodes GPS et RBM

Procédons à présent à la comparaison de nos méthodes GPS et GPS+ à la méthode d'estimation d'un contour adaptée à l'estimation d'un quantile décrite dans la partie 4.4. Nous utilisons les mêmes fonctions que pour la comparaison de nos deux méthodes à la stratégie SUR. Plus

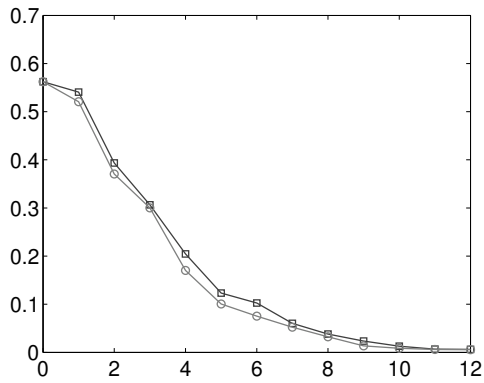
précisément, nous comparons les performances des deux méthodes pour l'estimation d'un quantile à 95% avec des tirages de Monte Carlo sur le choix de la grille A et de l'ensemble initial d'observations pour les trois fonctions g_1 , g_2 et g_3 , comme nous l'avons annoncé au début de ce chapitre.

Les résultats sont représentés dans la figure 5.3 à travers la moyenne des erreurs relatives calculées à chaque fois qu'un nouveau point est ajouté à l'ensemble des observations. Pour la fonction g_1 définie dans (3.17), on effectue 100 tirages de Monte Carlo, et on fixe $\beta = 1$; les résultats sont représentés dans la figure 5.3 (a). La méthode adaptée de l'estimation d'un contour donne des résultats très similaires à ceux obtenus pour notre stratégie pour les exemples de trajectoires de processus gaussien avec une fonction de covariance gaussienne définie dans (3.8). De la même manière, pour la fonction g_2 , les résultats sont très proches de ceux que nous avons obtenus pour la méthode GPS (après quelques essais, nous avons choisi ici de prendre $\beta = 3$).

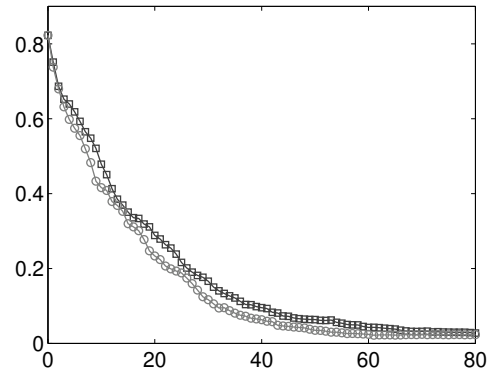
Ces bons résultats obtenus pour les fonctions g_1 et g_2 représentés dans la figure 5.3 (a) et (b) sont cependant à nuancer car le paramètre β a été choisi ici pour optimiser les performances de RBM. Néanmoins, nous avons expliqué lors de la description de la méthode dans la partie 4.4 que les performances de cette stratégie dépendent du choix de ce paramètre, et il n'est pas forcément facile de le fixer lorsque l'on connaît mal les valeurs de la fonction f . En particulier, pour les exemples représentés dans la figure 5.3, réaliser plusieurs essais en faisant varier les valeurs de β pour voir laquelle semblait le mieux convenir était tout à fait possible, alors que cela est inenvisageable dans le cas de données réelles.

De plus, les performances la méthode RBM ne sont pas bonnes pour pour la fonction g_3 , comme on peut le voir sur les graphes (c), (d), (e) et (f) de la figure 5.3. Nous avons commencé par comparer RBM (avec $\beta = 1$) et GPS sur la même grille; les résultats sont représentés dans la figure 5.3 (c). La méthode RBM n'a pas convergé vers la valeur du quantile. Nous comparons ensuite une version sans grille de RBM (en utilisant la fonction `fmincon` de Matlab pour minimiser l'opposé du critère (4.22)) à la méthode GPS+. Nous avons essayé plusieurs valeurs pour le paramètre β : $\beta = 1$ dans la figure 5.3 (d), $\beta = 0.01$ dans la figure 5.3 (e), et $\beta = 10$ dans la figure 5.3 (f). Nous constatons que, pour tous ces exemples, la méthode RBM ne converge pas vers le quantile à 95% de $g_3(x)$.

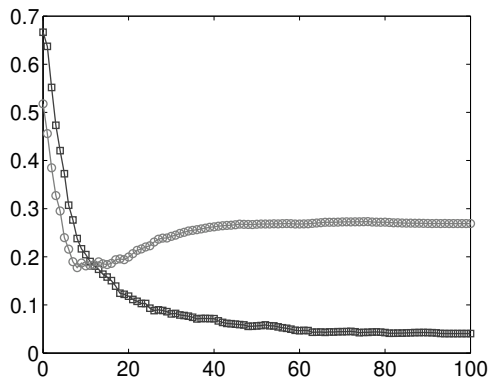
Ce problème du choix du paramètre β nous conduit donc à abandonner la méthode RBM adaptée à l'estimation d'un quantile pour l'application au données réelles du chapitre suivant.



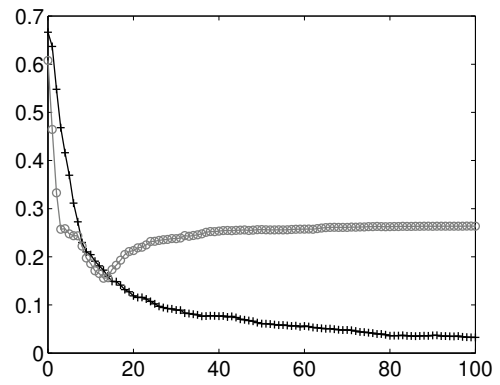
(a)



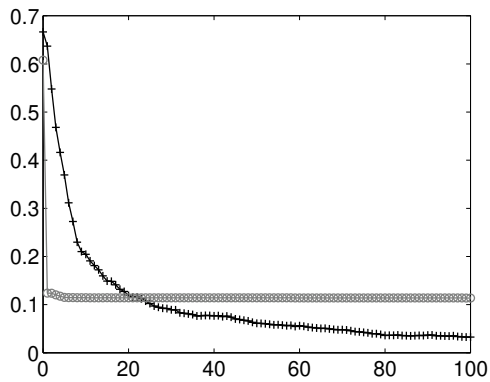
(b)



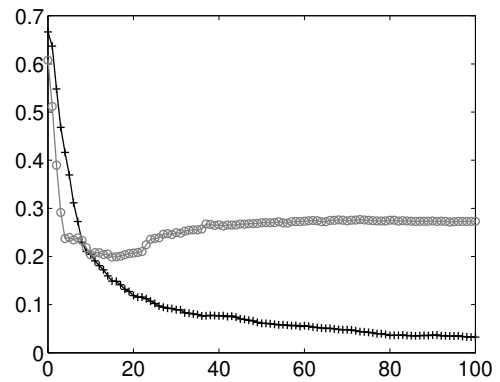
(c)



(d)



(e)



(f)

FIGURE 5.3 – Moyenne des erreurs relatives à chaque itération. Les méthodes GPS (carrés noirs), GPS+ (croix noirs), RBM (cercles gris clairs) sont appliquées pour la recherche du quantile à 95% de (a) $g_1(x)$, (b) $g_2(x)$, (c), (d), (e) et (f) $g_3(x)$ (respectivement $\beta = 1$, $\beta = 1$, $\beta = 0.01$ et $\beta = 10$).

5.4 Estimation des hyperparamètres

Jusqu'à présent, nous avons supposé que le ou les hyperparamètres intervenant dans la structure de covariance du processus gaussien étaient connus, et nous avons commencé par appliquer nos méthodes sans nous soucier de leur estimation. Cependant, cette étape d'estimation ne peut pas être évitée dans le cas de données réelles. La méthode que nous allons utiliser ici est celle de l'estimation par maximum de vraisemblance, qui est expliquée dans [Rasmussen and Williams, 2006]; cette façon de procéder est classique, même si elle nous amène hors du cadre complètement bayésien où il aurait fallu poser un a priori sur les lois suivies par les hyperparamètre.

L'estimation des hyperparamètres se traduit par une étape supplémentaire dans les algorithmes que nous étudions ici, car ils doivent être estimés avant d'évaluer la distribution a posteriori du processus gaussien en utilisant les formules (3.6) et (3.7). Ainsi, pour un ensemble d'observations $\{(x_1, y_1), \dots, (x_t, y_t)\}$ avec $y_i = f(x_i)$, $1 \leq i \leq t$, la log-vraisemblance a posteriori est donnée par :

$$-\frac{1}{2} \mathbf{y}'_t \mathbf{K}_t^{-1} \mathbf{y}_t - \frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_t| - \frac{t}{2} \log 2\pi, \quad (5.4)$$

avec $\mathbf{y}_t = (y_1, \dots, y_t)'$ et $\mathbf{K}_t = [k(x_i, x_j)]_{1 \leq i, j \leq t}$; c'est dans l'expression du noyau $k(\cdot, \cdot)$ que l'on retrouve quels sont les hyperparamètres à estimer. Dans notre cas, comme nous avons utilisé et utiliserons la structure de covariance gaussienne, $k(\cdot, \cdot)$ est de la forme définie dans (3.9); pour les applications aux données réelles du chapitre 6, nous utiliserons également les versions anisotrope des noyaux de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ et $\nu = 5/2$, définis respectivement dans (3.14) et (3.15). Les hyperparamètres ℓ_1, \dots, ℓ_d (d est le nombre de variables d'entrées) seront donc estimés en maximisant (5.4). Dans les applications qui vont suivre, nous utiliserons la fonction `fminsearch` de Matlab pour minimiser l'opposé de (5.4).

Nous allons comparer les performances de GPS et GPS+ sur l'exemple d'estimation du quantile à 95% de la fonction g_2 , réalisation de trajectoire de processus gaussien en dimension 2 définie dans (3.18), lorsque les hyperparamètres ℓ_1 et ℓ_2 sont estimés et lorsqu'ils ne le sont pas. Comme pour les exemples précédents, nous effectuons 50 tirages de Monte Carlo sur les points de départ et la grille sous-jacente A (utilisée pour la méthode GPS); les résultats sont représentés dans la figure 5.4. On observe que l'estimation des hyperparamètres n'altère pas les performances des stratégies pour l'estimation d'un quantile. Par conséquent nous continuerons d'utiliser cette méthode d'estimation des hyperparamètres pour nos applications aux données réelles.

Notons qu'il est important, dans le cas d'application à des données réelles où l'on ne dispose évidemment pas de valeur de référence pour le quantile et les valeurs des hyperparamètres, d'observer pas à pas les valeurs de ℓ_1, \dots, ℓ_d . En effet, si l'on commence avec très peu d'observations, les estimations des hyperparamètres ne seront pas forcément proches des vraies valeurs, ou seront même complètement aberrantes; au fil des itérations ces problèmes disparaissent et on observe que chaque hyperparamètre converge vers une valeur. Il faut donc être prudent avant de se fier aux estimations du quantile tant que l'estimation des hyperparamètres n'est pas "stabilisée".

Nous avons représenté dans la figure 5.5 et 5.6 les boxplots des estimations de ℓ_1 et ℓ_2 ; nous considérons une structure de covariance anisotrope, même si nous avons défini g_2 comme la réalisation d'une trajectoire de processus gaussien dont la covariance gaussienne est telle que

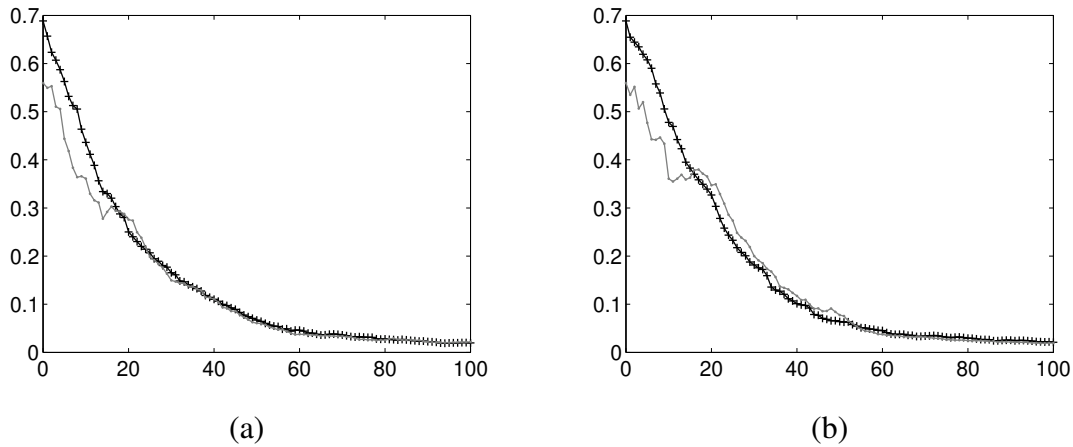
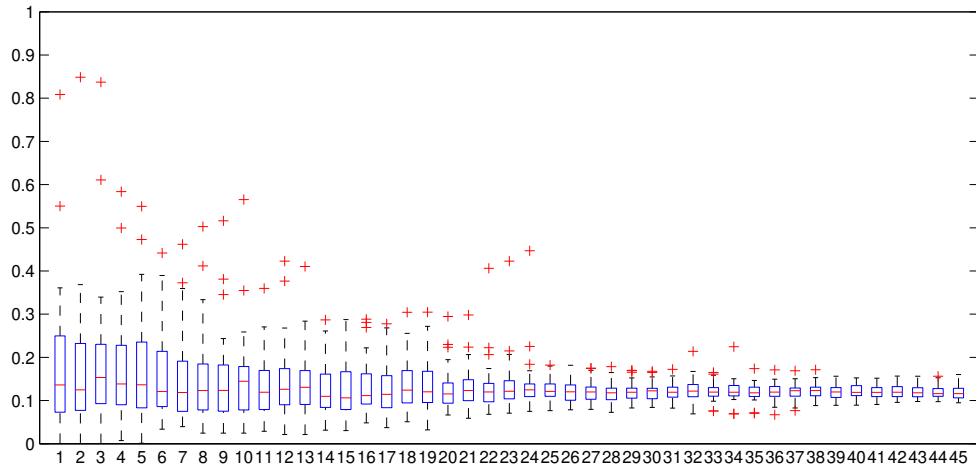


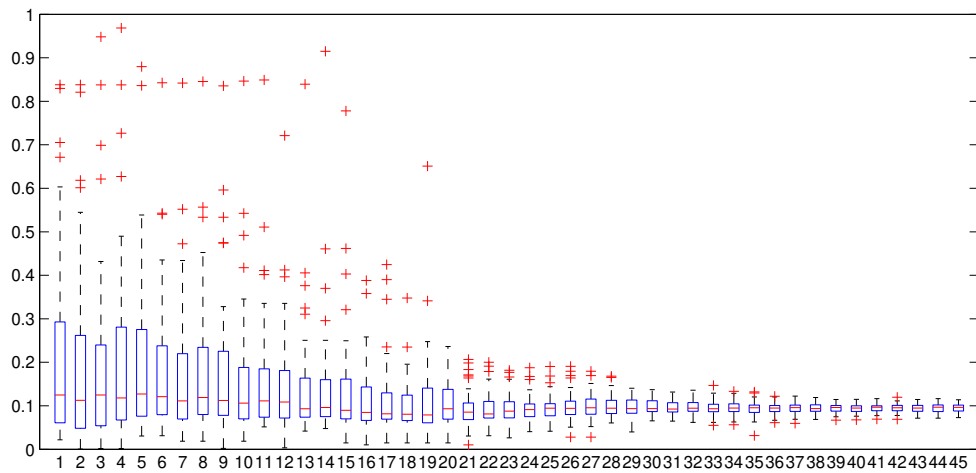
FIGURE 5.4 – Moyenne des erreurs relatives à chaque itération pour les méthodes (a) GPS et (b) GPS+ appliquées à l’estimation d’un quantile à 95% de la fonction g_2 . Les croix noires représentent les résultats sans estimation de ℓ , et les traits gris ceux où ℓ est estimé.

$\ell_1 = \ell_2 = 0.1$. Ces résultats correspondent aux 50 tirages de Monte Carlo sur les points de départ (et la grille sous-jacente dans le cas de GPS) des méthodes GPS et GPS+ dont les résultats ont été représentés dans la figure 5.4. Pour ces graphiques, pour plus de lisibilité, nous n’avons pas pris en compte quelques valeurs aberrantes obtenues (de l’ordre de 10^6 ou 10^5 selon les cas) pour les premières estimations de ℓ . Malgré ces valeurs, nous avons pu voir que les méthodes finissaient bien par converger vers les bonnes valeurs : $\ell_1 = \ell_2 = 0.1$.

Une note pour la lecture des boxplots : le trait le plus bas correspond à la valeur la plus basse de la série, les côtés de la boîtes sont le premier et le dernier quartile, le trait dans la boîte correspond à la médiane et le trait le plus haut à la valeur la plus élevée de la série. Les croix sont les valeurs aberrantes qui n’ont pas été prises en compte pour la construction de la boîte et des “bras” montrant l’étendue de la série.

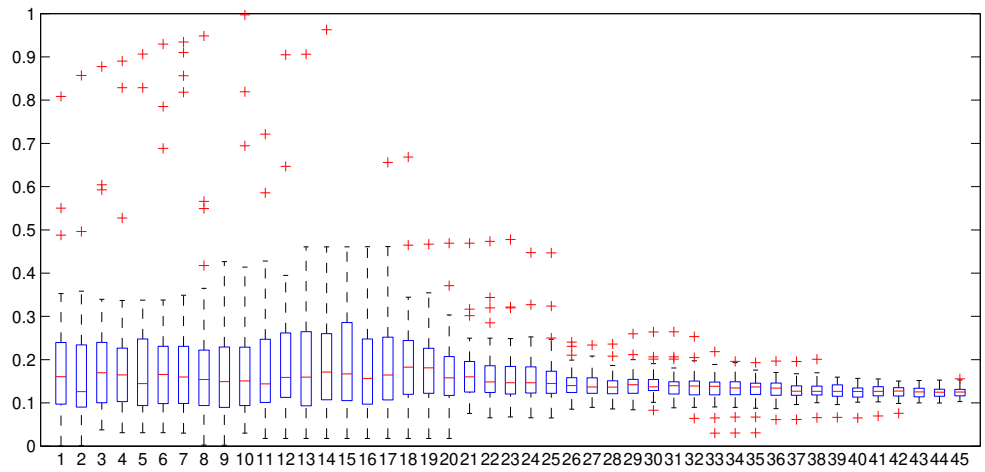


(a)

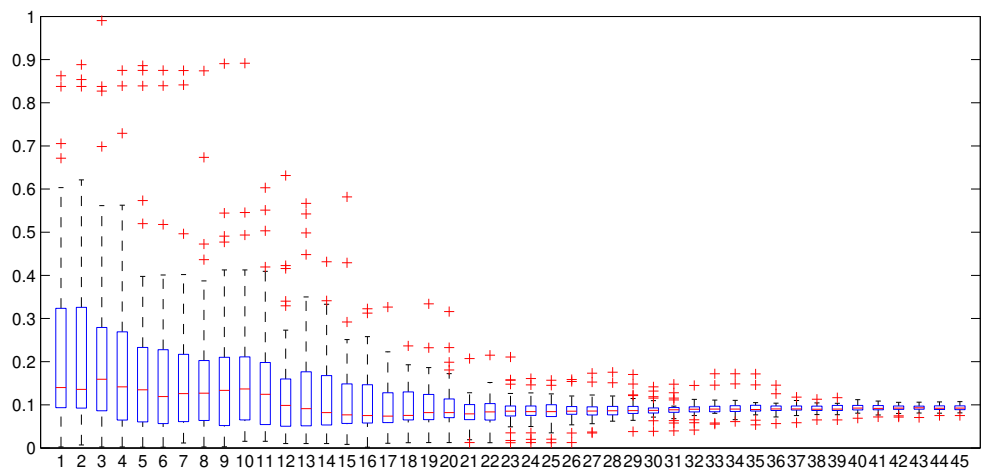


(b)

FIGURE 5.5 – Boxplots des estimations de (a) ℓ_1 et (b) ℓ_2 , pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS.



(a)



(b)

FIGURE 5.6 – Boxplots des estimations de (a) ℓ_1 et (b) ℓ_2 , pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS+.

Chapitre 6

Application à la dosimétrie numérique

Résumé

Dans ce chapitre, nous présentons l'application de nos méthodes GPS et GPS+ pour évaluer l'exposition de modèles de fœtus à des modèles de source d'ondes électromagnétiques. Dans un premier temps, nous appliquerons la méthode GPS au cas de l'exposition à une onde plane du modèle de la femme enceinte japonaise (présenté au chapitre 2). Les simulations de dosimétrie numérique étant relativement simples à mettre en place pour cet exemple, nous pourrions réaliser un grand nombre de simulations. Au contraire, dans le cas de l'exposition à une source proche (tablette Samsung Galaxy), le temps de mise en place des simulations est très important ; nous devons donc nous montrer parcimonieux. Pour cet exemple nous faisons appel à la méthode GPS+, car nous ne savons pas quelle taille de grille sous-jacente peut être adaptée à ce problème en dimension 3.

6.1 Exposition à une onde plane

L'exposition à une onde plane modélise l'exposition à un champ lointain, tel que les champs électromagnétiques radiofréquences émis par une antenne de station de base, ou une box wifi située suffisamment loin de l'utilisateur. Dans un premier temps, nous nous intéresserons au modèle de la femme enceinte japonaise, présenté au chapitre 2. Puis, nous présenterons un modèle géométrique simplifié de ce problème, où un cylindre contenant un ellipsoïde représentent respectivement la mère et le fœtus ; ce modèle permet d'éviter les simulations coûteuses de dosimétrie numérique, et de tester les méthodes pour $d > 3$ (où d est défini dans (3.5)).

6.1.1 La femme enceinte japonaise

Dans cette partie, les méthodes décrites précédemment vont être appliquées pour estimer le quantile à 95% du DAS (défini dans (2.1), dans le chapitre 2) d'un fœtus de 26 semaines. Cette application est d'autant plus intéressante que les études de dosimétrie existantes ont été menées d'un point de vue déterministe, c'est-à-dire avec un modèle de corps humain donné, dans une posture donnée et avec une seule configuration de l'exposition (une onde plane avec incidence frontale, le plus souvent). Nos résultats confirmeront que, pour une fréquence donnée, il ne suffit pas de s'intéresser à la valeur obtenue en considérant uniquement une onde plane avec incidence frontale.

Le modèle que nous utilisons ici est le modèle de la femme enceinte japonaise (présenté chapitre 2) : il s'agit d'un modèle de femme non enceinte, dont la morphologie correspond à celle de la japonaise moyenne (créé par [Nagaoka et al., 2004]), dans lequel un fœtus de 26 semaines a été inséré (voir [Nagaoka et al., 2007]).

Ce modèle est exposé à une onde électromagnétique plane, de polarisation verticale, de fréquence 900 MHz et d'amplitude 1 Volt par mètre. Des méthodes numériques permettent via la résolution des équations de Maxwell de modéliser la propagation des ondes ; ici c'est la méthode FDTD (Finite Difference Time Domain), qui est utilisée, comme c'est souvent le cas en bioélectromagnétisme (voir par exemple [Hirata et al., 2007], [Conil et al., 2008] et [Wiar et al., 2008]).

Le DAS est considéré comme une fonction de deux paramètres : l'azimut et l'élévation du rayon incident. La variation des angles du rayon incident autour du modèle de la femme japonaise est représentée dans la figure 6.1. Nous nous intéressons à deux DAS : d'une part, le DAS dans le corps entier du fœtus, et d'autre part le DAS évalué uniquement dans le cerveau du fœtus. Nous effectuons 1000 évaluations du DAS dans le fœtus, à partir d'un ensemble A (défini dans (4.3)) de points obtenus avec la fonction `lhsdesign` de Matlab. Ces simulations nous permettent d'avoir à la fois les valeurs du DAS corps entier et celles du DAS dans le cerveau du fœtus. Grâce à ces 1000 points, on peut estimer des quantiles de référence $\tilde{q}_{0.95}$ en suivant la définition de (5.2) ; dans ce cas nous n'avons pas pu calculer $\tilde{Q}_{0.95}$ (défini dans (5.1)), car il aurait fallu faire encore plus d'évaluations du DAS, ce qui n'était pas envisageable car un budget de 1000 simulations de dosimétrie numérique constitue déjà des coûts de calcul, de préparation et de stockage exceptionnels. Les valeurs de DAS obtenues en fonction de l'azimut et de l'élévation sont représentées dans la figure 6.2.

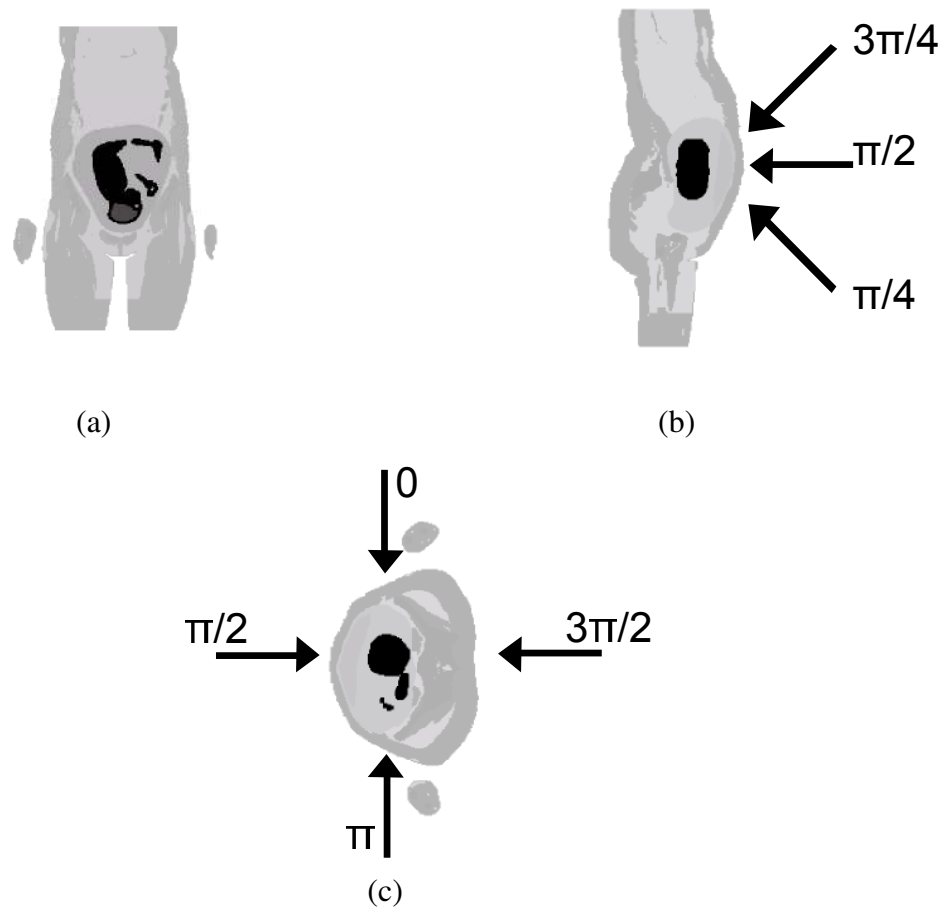


FIGURE 6.1 – (a) Vue de face du modèle (tronqué) de la femme enceinte japonaise ; (b) vue de côté, avec la variation de l'élévation ; (c) vue de dessus, avec la variation de l'azimut.

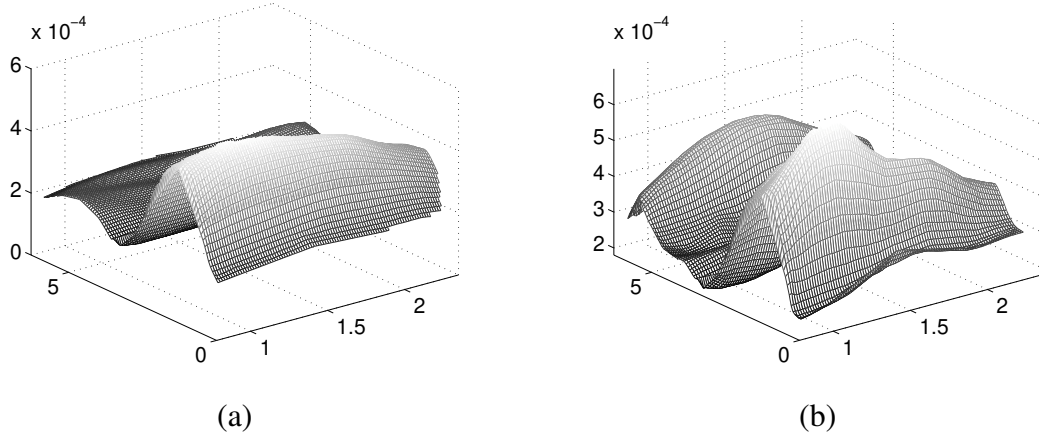


FIGURE 6.2 – Surface du DAS corps entier (a) et du DAS dans le cerveau du fœtus (b).

Application au DAS corps entier du fœtus

Grâce à nos 1000 simulations de dosimétrie numérique, nous pouvons donc calculer 1000 valeurs de DAS dans le corps entier du fœtus. Nous estimons notre quantile de référence à partir de ces 1000 valeurs : $\tilde{q}_{0.95} = 4.95 \times 10^{-4} \text{ W.kg}^{-1}$; en comparaison, la valeur du DAS obtenue pour l'incidence frontale est de $4.62 \times 10^{-4} \text{ W.kg}^{-1}$. Certes, il y a moins de 10% d'écart entre les deux valeurs, mais comme la valeur du quantile est plus élevée, cela confirme qu'on ne peut pas se contenter de la valeur du DAS obtenue pour l'incidence frontale comme référence. Nous allons maintenant appliquer notre méthode GPS pour estimer $\tilde{q}_{0.95}$ en utilisant le moins de points possible (rappelons que, n'ayant pas accès aux valeurs de f en dehors de celles évaluées en les points de la grille A, cette méthode est la seule que nous puissions appliquer ici).

À partir d'un ensemble initial de 5 observations choisies au hasard parmi A, la méthode GPS, en considérant que f est une réalisation de trajectoire de processus gaussien avec une fonction de covariance gaussienne (définie dans (3.9)), donne les résultats représentés dans la figure 6.3. La figure 6.3 (a) est la superposition du graphe de contour du DAS corps entier du fœtus en fonction de l'azimut et de l'élévation du rayon incident (représenté en 3D dans la figure 6.2) et des points initiaux et choisis par la méthode, numérotés dans l'ordre où ils ont été observés. Les lignes de niveau les plus claires correspondent aux valeurs les plus élevées de la fonction. Ainsi, on voit que la méthode conduit à sélectionner des points pour lesquels les valeurs de f sont élevées, et par conséquent proches du quantile à 95%.

La figure 6.3 (b) représente les quantiles. La ligne horizontale noire (représentée par ce motif : ' . - .') correspond à la valeur du quantile de référence $\tilde{q}_{0.95}$, calculée avec 1000 points. Les croix noires représentent $\hat{q}_{0.95,t}$, le quantile estimé à chaque itération de la méthode en utilisant la moyenne du processus gaussien comme métamodèle pour notre fonction inconnue. Les lignes grises représentent $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (définis dans (4.7)), le premier étant bien sûr celui dont les valeurs sont les plus élevées. On remarque d'une part que ces quantiles convergent bien vers notre valeur de référence. D'autre part, on note que $\hat{q}_{0.95,t}^U$, la borne supérieure de l'estimateur du quantile, n'est pas très fiable avant 20 itérations de la méthode. Cela vient du fait que le

métamodèle n'estime pas encore très bien la vraie fonction.

En effet, on peut voir dans la figure 6.3 (c) que les valeurs estimées du paramètre ℓ_1 n'ont pas encore convergé : avant 20 itérations, elles sont très instables, et ce n'est qu'après 40 itérations qu'elles atteignent la valeur d'environ 0.3 (ce qui est proche de ce que l'on peut estimer si l'on utilise toutes les évaluations du DAS). Il est donc important de tracer ces courbes d'estimation des hyperparamètres car elles fournissent un bon indicateur de la qualité de notre métamodèle ; ainsi, comme nous l'avons déjà remarqué lors du chapitre 5, tant que l'estimation de ℓ n'est pas stable, les estimations du quantile et de ses bornes doivent être considérées avec précaution.

Enfin, la figure 6.3 (d) représente les erreurs relatives commises sur l'estimation du quantile (par rapport à notre quantile de référence $\tilde{q}_{0.95}$) à chaque itération. Nous constatons que, même si les graphes précédents nous ont conduit à juger que le métamodèle n'était pas très bon avant 20 itérations, il faut moins de 10 itérations pour atteindre une erreur de 10% sur le quantile, et en 15 itérations de la méthode GPS l'erreur est inférieure à 5%. Ainsi, grâce à cette façon de sélectionner nos observations, nous avons besoin de 40 fois moins de points pour obtenir une estimation précise de $\tilde{q}_{0.95}$ que si nous n'avions pas eu recours à une méthode adaptative.

Confirmons ces résultats avec 50 tirages de Monte Carlo sur le choix des 5 points de départ initiaux ; les résultats sont représentés dans la figure 6.4 (a) et (b). Nous comparons les performances de GPS selon la covariance $k(\cdot, \cdot)$ utilisée : le noyau gaussien, défini dans (3.9) dont nous venons de montrer un exemple, et les versions anisotropes des noyaux de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ et $\nu = 5/2$, définis dans (3.14) et (3.15).

Les moyennes des erreurs relatives à chaque itération sont représentées dans la figure 6.4 (a). Pour ces trois structures de covariance, on obtient des estimations précises du quantile : la covariance gaussienne donne les meilleures performances au début tandis qu'après 20 itérations la fonction de covariance de Matérn avec le paramètre $\nu = 5/2$ est la plus fiable. Ces résultats font écho à ceux qui sont représentés dans la figure 6.4 (b), où l'on peut voir les moyennes de $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ pour la stratégie GPS avec les trois mêmes structures de covariance, pour les mêmes 50 tirages de Monte Carlo.

Pour ces 50 tirages, nous pouvons également tracer les boxplots des estimations de ℓ_1 et ℓ_2 à chaque itération de la méthode. Les résultats sont représentés dans la figure 6.5 pour le noyau gaussien, dans la figure 6.6 pour le noyau de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ et dans la figure 6.7 pour le noyau de Matérn de paramètre $\nu = 5/2$. Pour ℓ_1 en particulier, quelque soit le noyau utilisé, la variance est très grande pour les premières itérations ; ce phénomène est moins prononcé pour ℓ_2 . Notons que, pour le noyau gaussien par exemple, ℓ_1 converge vers une valeur proche de 0.3, tandis que ℓ_2 converge vers une valeur proche de 0.1 ; ces résultats sont cohérents avec ce que l'on observe dans la figure 6.2 (a). En effet, les variations du DAS dans le corps entier du fœtus sont plus importantes en fonction de l'azimut (paramètre associé ℓ_2) qu'en fonction de l'élévation (paramètre associé à ℓ_1). Les deux autres structures de covariance permettent de tirer des conclusions similaires, les estimations de ℓ_2 étant de l'ordre de 0.2 alors que celles de ℓ_1 convergent vers des valeurs proches de 1.

Les figures 6.5, 6.6 et 6.7 nous permettent également de constater que les moins bonnes performances des noyaux de Matérn par rapport au noyau gaussien ne peuvent pas s'expliquer par une mauvaise estimation des hyperparamètres pour les noyaux de Matérn. Le noyau gaussien est celui qui semble donc le plus adapté à ce problème d'estimation du quantile à 95% du DAS

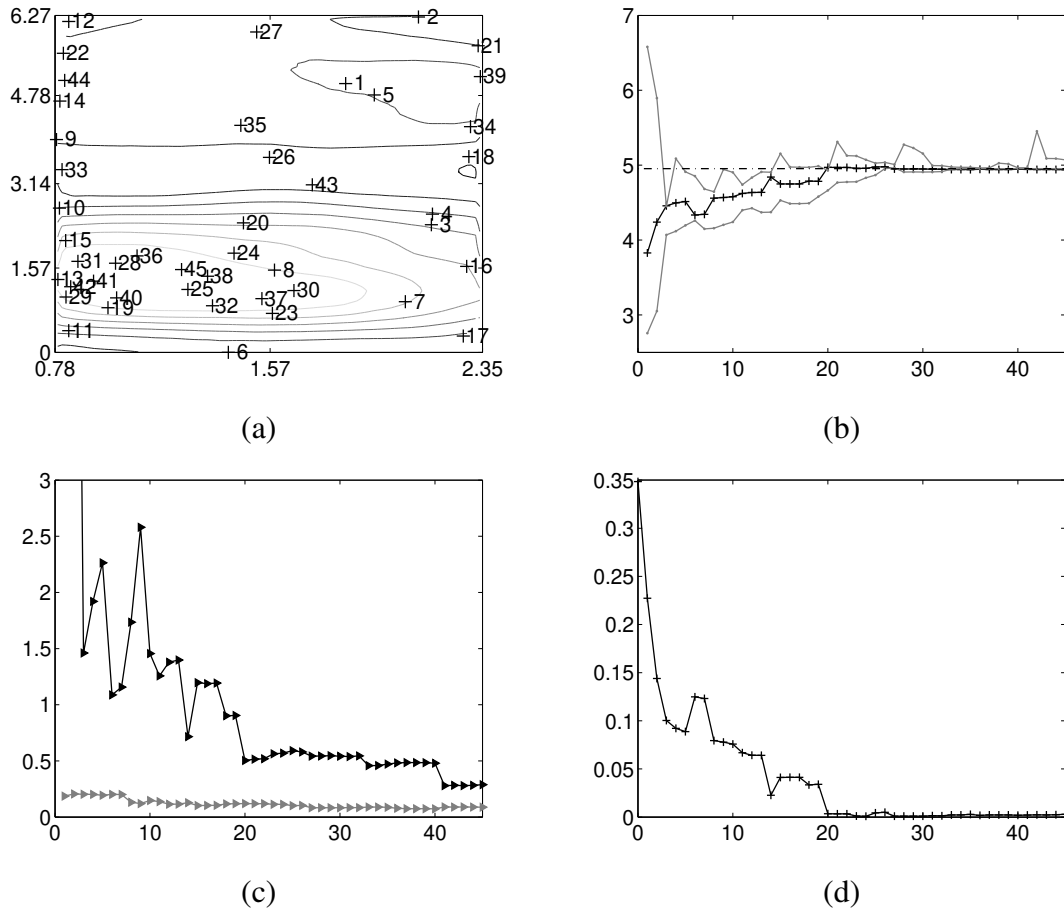


FIGURE 6.3 – Un exemple d’application de la méthode GPS avec un a priori de processus gaussien et une structure de covariance gaussienne. (a) Graphe des contours du DAS corps entier dans le fœtus et observations numérotées. En fonction du nombre d’itérations de la méthode : (b) $\tilde{q}_{0.95}$ (‘-.’), $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (traits gris) et $\hat{q}_{0.95,t}$ (croix noires) ; (c) estimations de ℓ_1 (triangles noirs) et ℓ_2 (triangles gris) ; (d) erreurs relatives $|\tilde{q}_{0.95} - \hat{q}_{0.95,t}|/\tilde{q}_{0.95}$.

corps entier du modèle de fœtus de la femme enceinte japonaise, car c’est celui pour lequel on obtient plus rapidement une erreur plus faible. Cependant si l’on voulait plus de précision, il vaudrait mieux utiliser la structure de covariance de Matérn avec le paramètre $\nu = 5/2$.

Dans tous les cas, le constat que nous avons fait pour l’exemple représenté dans la figure 6.3 reste valable ici : en moyenne, et pour toutes les structures de covariance, en appliquant la méthode GPS à la recherche du quantile à 95% du DAS dans le corps entier du fœtus, on a estimé $\tilde{q}_{0.95}$ avec une erreur inférieure à 2% en réalisant 40 fois moins d’observations (5 points de départ et 20 points choisis par la méthode parmi les 1000 points qui ont servi à évaluer $\tilde{q}_{0.95}$).

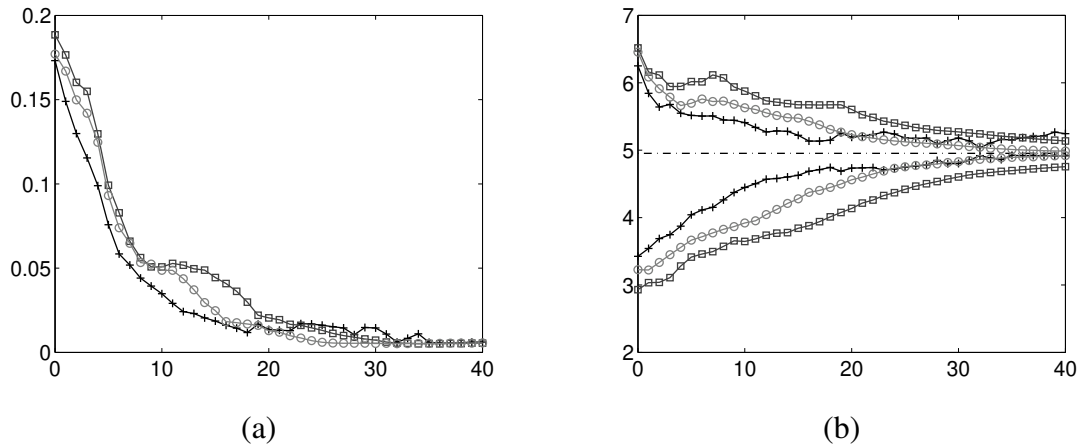
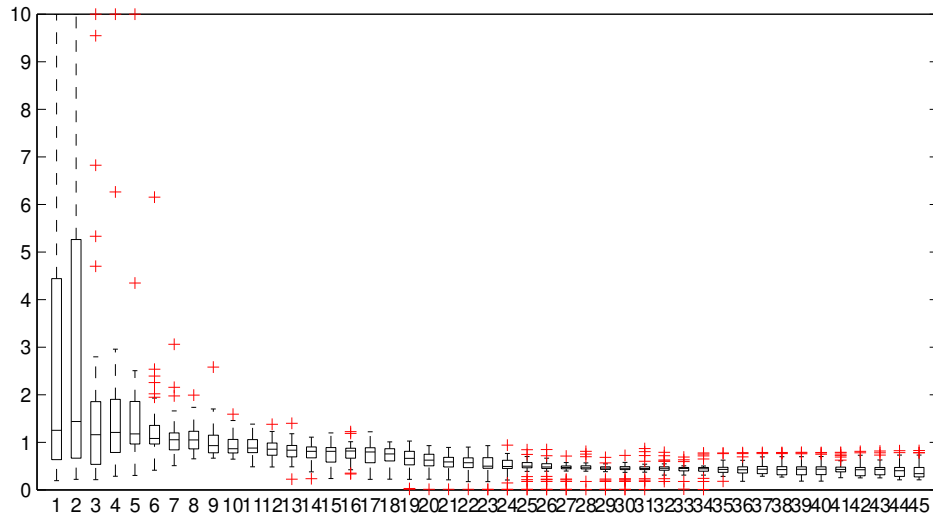


FIGURE 6.4 – Résultats des 50 tirages de Monte Carlo sur le choix des cinq points de départ en appliquant la méthode GPS. Les croix noires représentent les résultats du noyau gaussien, les carrés noirs ceux du noyau de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ et les cercles gris ceux du noyau de Matérn avec $\nu = 5/2$. (a) Moyennes des erreurs relatives en fonction du nombre d’itérations. (b) Moyennes des bornes du quantile à chaque itération, avec $\tilde{q}_{0.95}$ représenté par la ligne ‘.-.’.

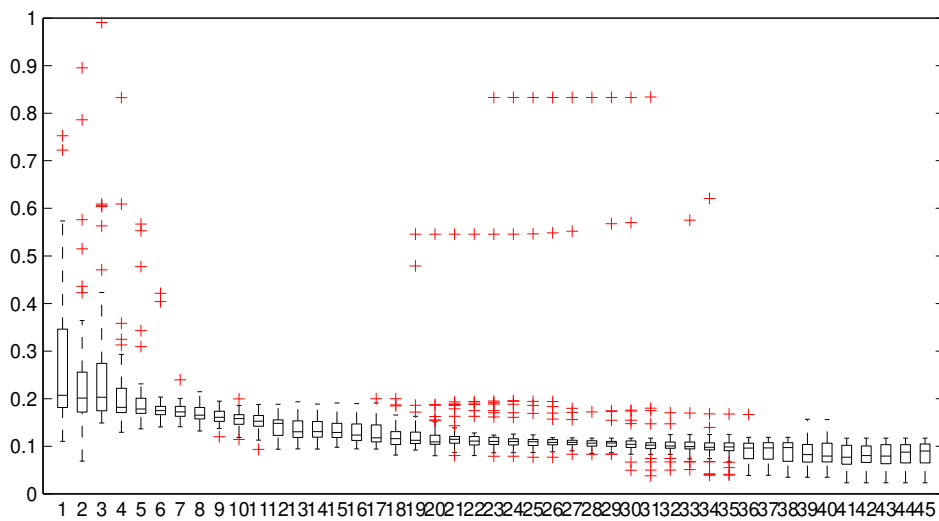
Application au DAS dans le cerveau du fœtus

Considérons tout d’abord les résultats du DAS dans le cerveau obtenus pour les 1000 évaluations réalisées ; la courbe en 3D est représentée dans la figure 6.2 (b). Le quantile à 95% calculé à partir de ces 1000 évaluations, que nous allons utiliser comme référence, vaut $5.67 \cdot 10^{-4} \text{W} \cdot \text{kg}^{-1}$. En comparaison, nous avons évalué le DAS dans le cerveau du fœtus (pour ce modèle de femme enceinte et de fœtus) pour une onde plane d’incidence frontale à 900 MHz à $4.77 \cdot 10^{-4} \text{W} \cdot \text{kg}^{-1}$. Pour cet exemple, l’écart entre les deux valeurs est donc de près de 20%, ce qui confirme qu’on ne peut se contenter d’évaluer le DAS avec cette configuration unique dans le cas de l’exposition du cerveau du fœtus. Remarquons que l’ordre de grandeur des valeurs de DAS dans le cerveau est le même que celui du DAS corps entier du fœtus (soit $10^{-4} \text{W} \cdot \text{kg}^{-1}$) ; pour expliquer cela il faut revenir à la définition du DAS donnée dans (2.1). En effet, si la puissance absorbée dans le corps entier du fœtus est de l’ordre de 10^{-4}W et celle du cerveau de l’ordre de 10^{-5}W , la division par un poids de 0.843 kg pour le corps entier du fœtus et respectivement, un poids de 0.121 kg pour son cerveau, permet bien d’obtenir les résultats que nous avons ici.

Appliquons maintenant notre stratégie GPS pour estimer le quantile à 95% du DAS dans le cerveau du fœtus, en utilisant une structure de covariance gaussienne (définie dans (3.9)) pour notre a priori de processus gaussien, et à partir d’un ensemble initial de 5 observations choisies au hasard parmi A ; les résultats sont représentés dans la figure 6.8. La figure 6.8 (a) est la superposition du graphe de contour du DAS dans le cerveau du fœtus en fonction de l’azimut et de l’élévation du rayon incident (représenté en 3D dans la figure 6.2 (b)) et des points initiaux et choisis par la méthode, numérotés dans l’ordre où ils ont été observés. Les lignes de niveau les plus claires correspondent aux valeurs les plus élevées de la fonction. Les points sélectionnés par la méthode sont répartis dans tout l’espace, mais finissent par se concentrer dans la zone où les

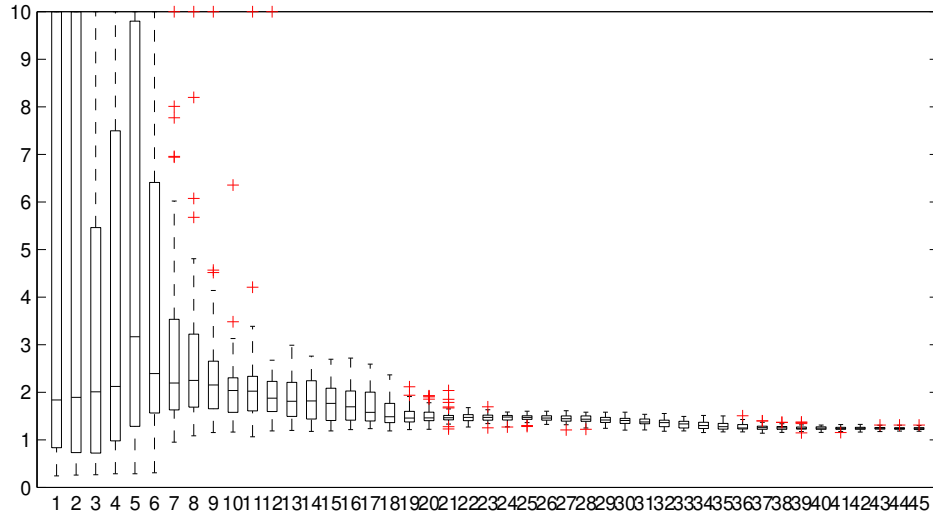


(a)

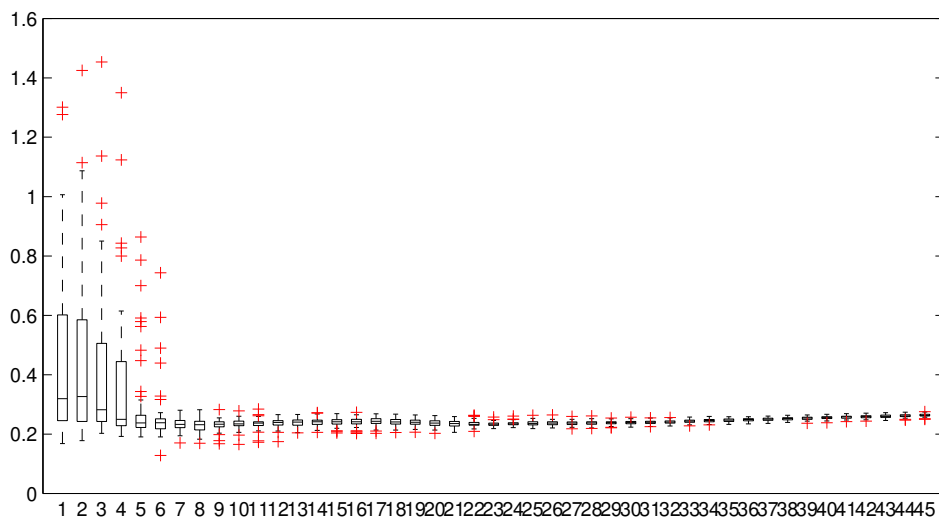


(b)

FIGURE 6.5 – Boxplots des estimations de l_1 (a) et l_2 (b), pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS avec un noyau gaussien pour fonction de covariance du processus gaussien, réalisés à partir de 50 tirages de Monte Carlo sur les 5 points de départ.

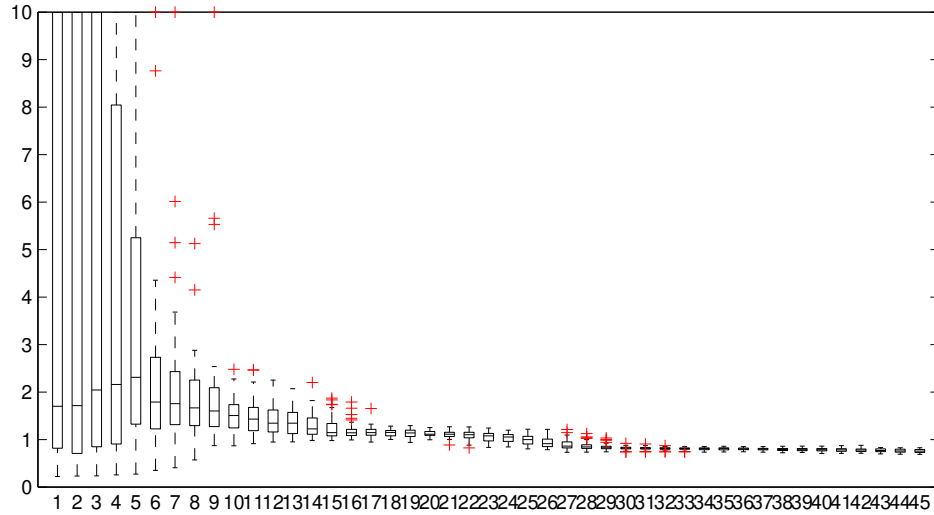


(a)

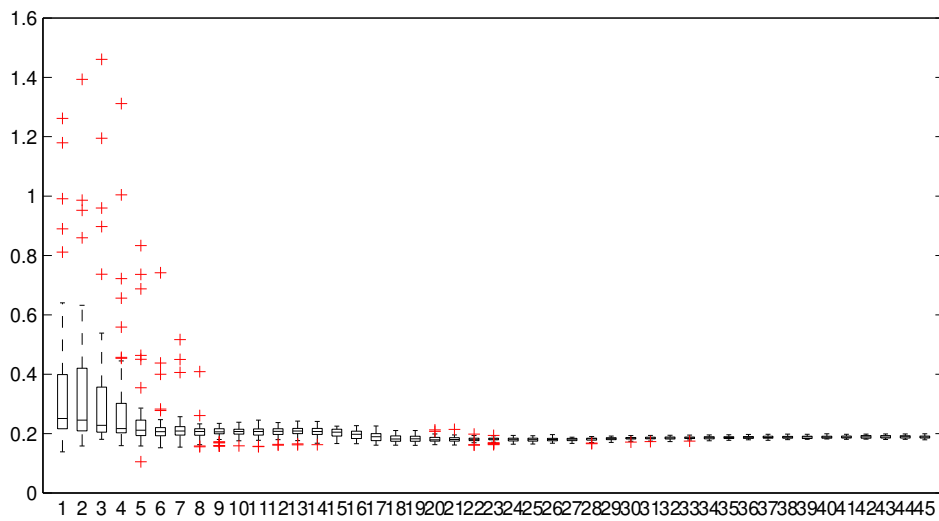


(b)

FIGURE 6.6 – Boxplots des estimations de l_1 (a) et l_2 (b), pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS avec un noyau de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ pour fonction de covariance du processus gaussien, réalisés à partir de 50 tirages de Monte Carlo sur les 5 points de départ.



(a)



(b)

FIGURE 6.7 – Boxplots des estimations de l_1 (a) et l_2 (b), pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS avec un noyau de Matérn de paramètre $\nu = 5/2$ pour fonction de covariance du processus gaussien, réalisés à partir de 50 tirages de Monte Carlo sur les 5 points de départ.

valeurs du DAS dans le cerveau sont élevées, et par conséquent proches du quantile à 95%.

La figure 6.8 (b) représente les valeurs des quantiles à chaque itération. La ligne horizontale noire (représentée par ce motif : ' . - . ') correspond à la valeur du quantile de référence $\tilde{q}_{0.95}$, calculée avec 1000 points. Les croix noires représentent $\hat{q}_{0.95,t}$, le quantile estimé à chaque itération de la méthode en utilisant la moyenne du processus gaussien comme métamodèle pour notre fonction inconnue. Les lignes grises représentent $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (définis dans (4.7)), bornes supérieure et inférieure du quantile, qui convergent bien vers notre valeur de référence.

Les estimations des paramètres ℓ_1 et ℓ_2 au fil des itérations sont représentées dans la figure 6.8 (c). Lors des premières itérations le paramètre ℓ_1 est très mal estimé, mais après ajout de 30 points et plus, les valeurs estimées sont stables ; finalement, après 60 itérations, les estimations ont convergé.

Ce constat se confirme avec les résultats de la figure 6.8 (d), où les erreurs relatives commises sur l'estimation du quantile (par rapport à notre quantile de référence $\tilde{q}_{0.95}$) à chaque itération sont représentées. En effet, après 60 itérations de la méthode GPS, $\hat{q}_{0.95,t}$ est très proche de la valeur calculée avec 1000 points. Pour cet exemple en particulier on remarque néanmoins que les erreurs sont très faibles depuis le début. Dans le cas d'une application où l'on n'aurait pas pu calculer le quantile de référence, il aurait fallu se fier uniquement aux figures 6.8 (b) et (c) et l'on se serait arrêté après 65 évaluations du DAS au total, ce qui représente plus de 15 fois moins d'évaluations que pour $\tilde{q}_{0.95}$.

Comparons à présent les performances de GPS selon la structure de covariance $k(\cdot, \cdot)$ utilisée : le noyau gaussien, défini dans (3.9), et les noyaux de Matérn avec $\nu = 3/2$ et $\nu = 5/2$, définis dans (3.14) et (3.15), respectivement. Les moyennes des erreurs relatives à chaque itération sont représentées dans la figure 6.9 (a), pour 50 tirages de Monte Carlo sur les 5 points de départs initiaux. Pour ces trois priors, on obtient des estimations précises du quantile : après une dizaine d'itérations de la méthode, l'erreur est inférieure à 10% quelque soit le noyau utilisé. Pour une erreur inférieure à 5% il faut 25 points de plus en moyenne pour le noyau gaussien, 37 pour le noyau de Matérn de paramètre $\nu = 5/2$ et 39 pour le noyau de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$. Ainsi, on constate que le noyau gaussien apparaît comme le plus adapté à nos applications, même dans ce cas où la fonction est moins "lisse" (en comparant les tracés des surfaces des figures 6.2 (a) et (b)).

Ces résultats sont confirmés par la figure 6.9 (b) où l'on voit que les meilleures performances en terme de convergence des bornes $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ vers le vrai quantile sont celles obtenues en utilisant une fonction de covariance gaussienne. On choisit donc de ne tracer les boxplots des estimations de ℓ_1 et ℓ_2 uniquement pour l'application de notre méthode séquentielle avec cette structure de covariance. Les résultats sont représentés dans la figure 6.10.

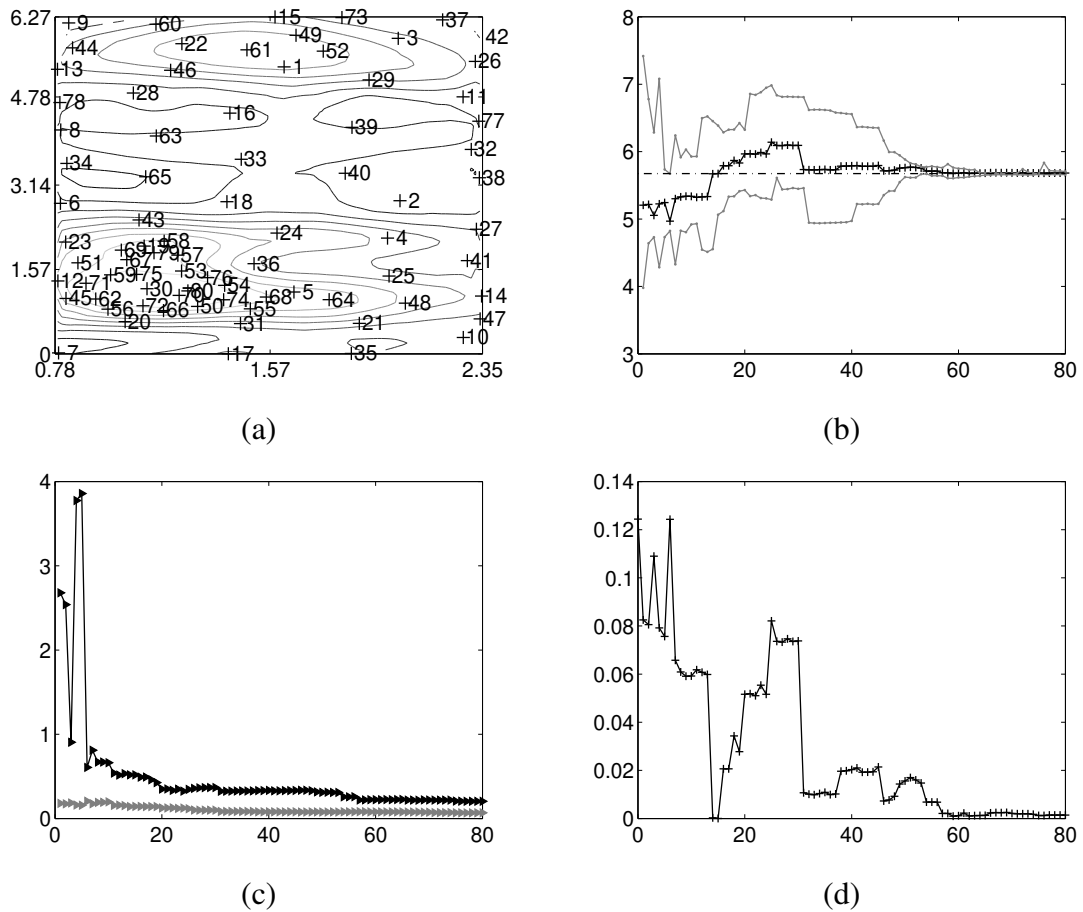


FIGURE 6.8 – Un exemple d’application de la méthode GPS avec un noyau gaussien pour la covariance k du processus gaussien. (a) Graphe des contours du DAS dans le cerveau du fœtus et observations numérotées. En fonction du nombre d’itérations de la méthode : (b) $\tilde{q}_{0.95}$ (‘.-.’), $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (traits gris) et $\hat{q}_{0.95,t}$ (croix noires); (c) estimations de ℓ_1 (triangles noirs) et ℓ_2 (triangles gris); (d) erreurs relatives $|\tilde{q}_{0.95} - \hat{q}_{0.95,t}| / \tilde{q}_{0.95}$.

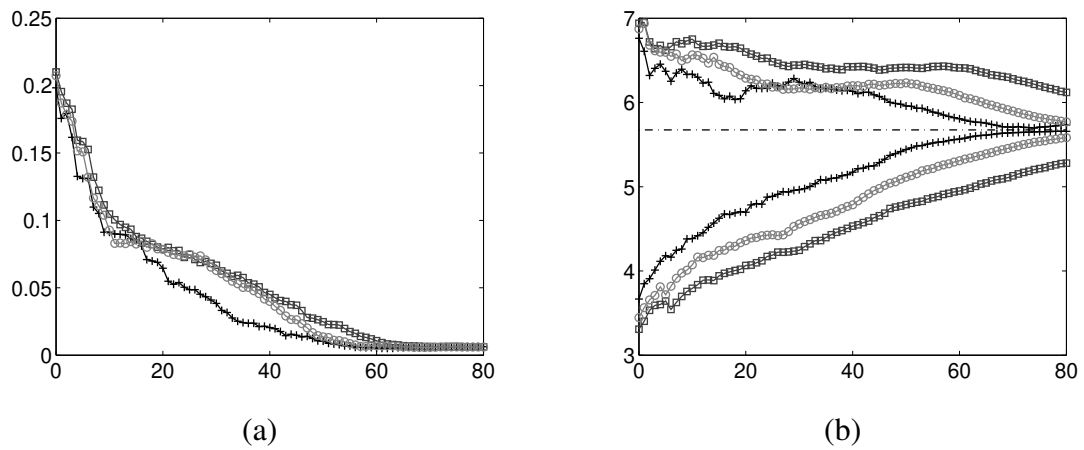
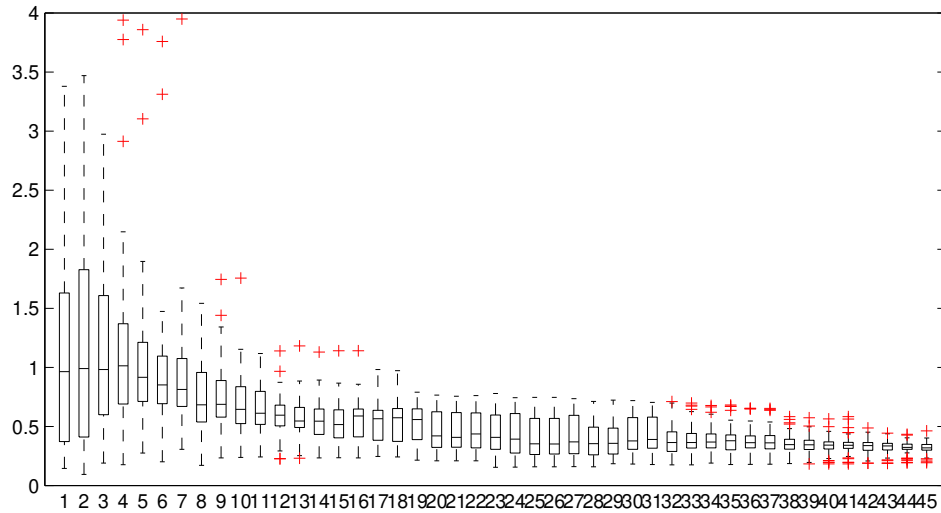
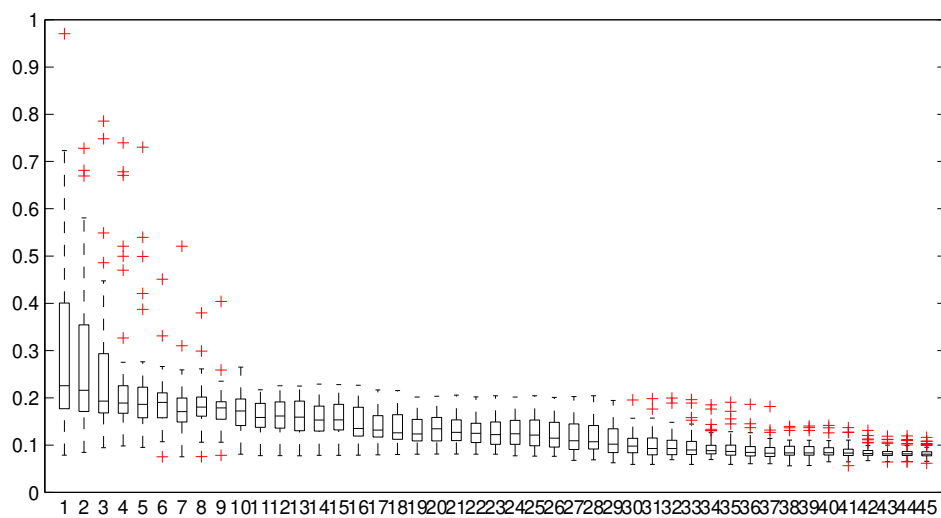


FIGURE 6.9 – Résultats des 50 tirages de Monte Carlo sur le choix des cinq points de départ en appliquant la méthode GPS. Les croix noires représentent les résultats du noyau gaussien, les carrés noirs ceux du noyau de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ et les cercles gris ceux du noyau de Matérn avec $\nu = 5/2$. (a) Moyennes des erreurs relatives en fonction du nombre d'itérations. (b) Moyennes des bornes du quantiles à chaque itération, avec $\tilde{q}_{0.95}$ représenté par la ligne '-.-'.



(a)



(b)

FIGURE 6.10 – Boxplots des estimations de ℓ_1 (a) et ℓ_2 (b), pour les itérations 1 à 45 de la méthode GPS avec un noyau gaussien pour la covariance k du processus gaussien, réalisés à partir de 50 tirages de Monte Carlo sur les 5 points de départ.

6.1.2 Utilisation d'un modèle géométrique simplifié

Construction du modèle

Dans le but de disposer d'une fonction analytique multidimensionnelle qui se rapproche de notre application pratique, nous avons créé un modèle géométrique simplifié pour représenter l'exposition d'un fœtus à une onde plane. Notre modélisation repose sur deux justifications physiques. D'une part, aux fréquences des télécommunications (de 900 à 2400 MHz), l'absorption est majoritairement surfacique ; par conséquent, l'absorption dans un corps humain dépend de la surface éclairée par l'onde incidente (voir [Conil et al., 2011]). De plus, dans le cas du fœtus, l'onde traverse les tissus de la mère, l'absorption dans ces tissus peut être décrite par une décroissance exponentielle en fonction de l'épaisseur des couches à traverser avant d'atteindre le fœtus. Ainsi, en représentant le fœtus par un ellipsoïde inséré dans un cylindre représentant la mère comme dans la figure 6.11, la puissance absorbée par le fœtus est donnée par :

$$P(\mathbf{x}) = \alpha S(\mathbf{x}) \exp(-\beta d(\mathbf{x})) \quad (6.1)$$

avec S surface projetée de l'ellipsoïde, qui dépend de 8 paramètres : les trois longueurs des demi-axes de l'ellipsoïde, trois rotations selon les axes de l'ellipsoïde, l'azimut et l'élévation du rayon incident ; d la distance traversée par l'onde incidente de l'entrée dans les tissus de la mère jusqu'au fœtus, qui dépend de trois paramètres supplémentaires : le rayon du cylindre, et les coordonnées du centre de l'ellipsoïde dans le plan horizontal ; \mathbf{x} est donc un vecteur de \mathbb{R}^{11} ; $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ sont des coefficients à ajuster pour un modèle de femme enceinte donné, ils correspondent à la morphologie et aux propriétés diélectriques des tissus.

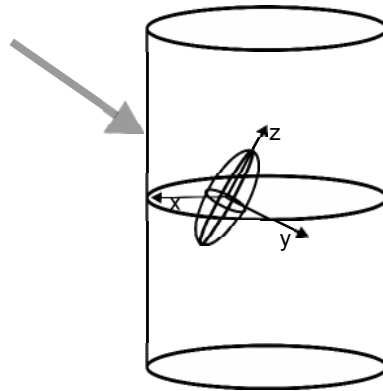


FIGURE 6.11 – Le model géométrique simplifié.

L'ellipsoïde est définie, dans le repère dont le centre et les axes coïncident avec son centre et ses axes, par :

$$\left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 \text{ tel que : } \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}' = 1 . \right\}$$

avec a , b et c des paramètres strictement positifs donnés, qui correspondent aux longueurs des demi-axes de l'ellipsoïde. Pour se représenter la surface projetée S de cet ellipsoïde, il faut imaginer l'ombre qu'on obtiendrait sur un plan perpendiculaire au rayon incident placé derrière l'ellipsoïde ; S ne dépend donc pas du cylindre mais uniquement de la taille et des angles d'inclinaison de l'ellipsoïde, ainsi que de l'angle d'arrivée du rayon incident. Pour calculer S , nous nous plaçons dans le repère où l'axe des abscisses coïncide avec le rayon incident qui passe par le centre de l'ellipsoïde ; l'équation de l'ellipsoïde dans ce nouveau repère s'écrit :

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right) \in \mathbb{R}^3 \text{ tel que : } \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right) A \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right)' = 1 . \right\} \quad (6.2)$$

avec la matrice A définie par :

$$A = (VU) \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{pmatrix} (VU)' , \quad (6.3)$$

où a , b et c sont les longueurs des demi-axes de l'ellipsoïde dans son repère propre, ' désigne la transposition matricielle et U et V sont des matrices de rotation et de changement de repère définies par

$$U = \begin{pmatrix} \cos(\theta_z) & -\sin(\theta_z) & 0 \\ \sin(\theta_z) & \cos(\theta_z) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta_y) & 0 & -\sin(\theta_y) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\theta_y) & 0 & \cos(\theta_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_x) & -\sin(\theta_x) \\ 0 & \sin(\theta_x) & \cos(\theta_x) \end{pmatrix} , \quad (6.4)$$

avec θ_z , θ_y et θ_x qui désignent respectivement les rotations autour des axes z , y et x du repère propre de l'ellipsoïde, et

$$V = \begin{pmatrix} \cos(\phi_a) & -\sin(\phi_a) & 0 \\ \sin(\phi_a) & \cos(\phi_a) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\phi_e) & 0 & -\sin(\phi_e) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\phi_e) & 0 & \cos(\phi_e) \end{pmatrix} , \quad (6.5)$$

avec ϕ_a et ϕ_e qui désignent respectivement l'azimut et l'élévation du rayon incident.

Il suffit alors de prendre $x = 0$ dans (6.2) pour écrire l'équation de l'ellipse dont il faut calculer l'aire pour obtenir la valeur de la surface projetée. Le problème est que cette aire correspond à une intégrale compliquée à évaluer ; nous allons donc la calculer par approximation, en utilisant une grille. Nous avons représenté sur la figure 6.12 les résultats que l'on peut obtenir pour la projection d'un ellipsoïde dont les longueurs des demi-axes sont $a = 1$, $b = 2$, $c = 3$, lorsque l'azimut et l'élévation du rayon incident varient. Cet exemple n'est pas réaliste car une élévation de $\pi/2$ signifie que le rayon incident arrive à la verticale, ce que l'on n'observe pas dans la réalité ; néanmoins il illustre les explications que nous avons données ici.

Pour calculer la distance traversée par le rayon incident, nous faisons également une approximation, qui consiste à prendre pour $d(\cdot)$ la moyenne de trois distances calculées à partir du rayon

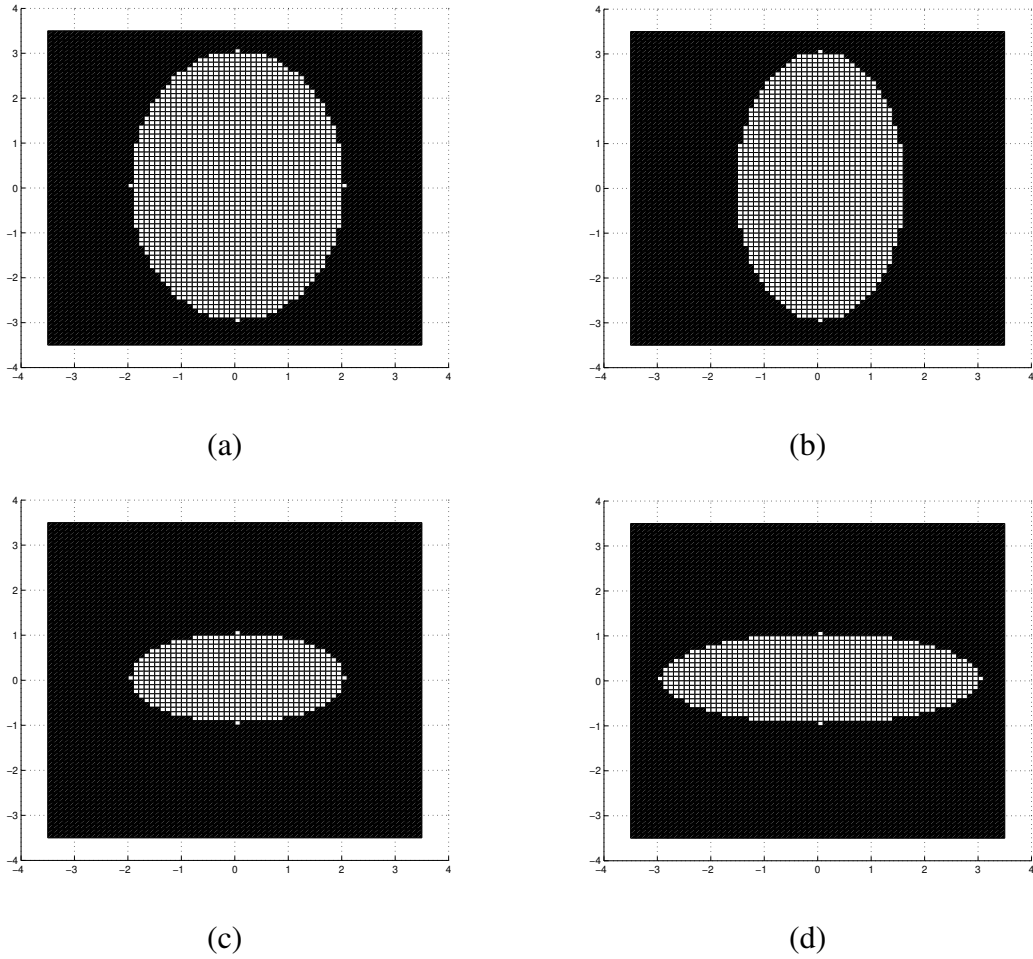


FIGURE 6.12 – Exemple (simple) de projection d’ellipsoïde en fonction du rayon incident avec notre calcul approché de surface. Selon les notations de (6.3), (6.4) et (6.5) : $a = 1$, $b = 2$, $c = 3$, $\theta_x = \theta_y = \theta_z = 0$ et (a) $\phi_a = 0$ et $\phi_e = 0$; (b) $\phi_a = \pi/4$ et $\phi_e = 0$; (c) $\phi_a = 0$ et $\phi_e = \pi/2$; (d) $\phi_a = \pi/2$ et $\phi_e = \pi/2$.

incident passant par trois points : le centre de l’ellipsoïde, et les deux points marquant l’intersection de l’ellipsoïde et son axe z (selon la notation employée sur la figure 6.11). La distance est celle que le rayon incident parcourt de son point d’intersection avec le cylindre à son point d’intersection avec l’ellipsoïde. Afin de faciliter les calculs, nous nous plaçons dans ce cas dans le repère associé au cylindre qui représente la mère. Cela implique de définir les coordonnées du centre de l’ellipsoïde dans ce repère (pour effectuer le changement de repère) et de prendre en compte le rayon r du cylindre. Dans ce cas, l’ellipsoïde est défini par (6.2), avec une matrice A définie par

$$A = U \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{pmatrix} U' ,$$

avec U définie dans (6.4), et que les coordonnées du vecteur directeur du rayon incident dans le repère de l'ellipsoïde sont données par :

$$v = \begin{pmatrix} \cos(\phi_a) \cos(\phi_e) \\ \sin(\phi_a) \cos(\phi_e) \\ \sin(\phi_e) \end{pmatrix},$$

avec ϕ_a et ϕ_e qui désignent respectivement l'azimut et l'élévation du rayon incident, on peut calculer l'intersection du rayon incident avec le cylindre et avec l'ellipsoïde. On aura alors, pour chacun des trois points pour lesquels nous voulons évaluer cette distance, deux valeurs possibles, et c'est la valeur de l'azimut qui permet de choisir laquelle convient : si ϕ_a appartient à $[0 ; \pi]$, l'onde arrive de face par rapport à la mère et on choisit la distance la plus courte, et si ϕ_a appartient à $] \pi ; 2\pi[$, l'onde arrive de dos, et la distance est donc la plus longue des deux.

Pour représenter la fonction (6.1), il nous faut encore choisir des valeurs pour α et β . Ne connaissant pas l'ordre de grandeur de ces deux paramètres, nous nous proposons de les estimer en utilisant le modèle de la femme enceinte japonaise et son fœtus de 26 semaines de l'application que nous avons présentée au paragraphe précédent. Néanmoins nous nous plaçons dans un cas beaucoup plus simple : nous évaluons (grâce à des simulations de dosimétrie numérique) la puissance absorbée dans le corps entier du fœtus pour $n = 36$ valeurs d'azimut données, puis en utilisant des vues du modèle, nous essayons de fixer approximativement les autres paramètres, sachant que notre fœtus n'est pas un ellipsoïde et notre modèle de femme enceinte n'est pas cylindrique non plus. Nous prenons alors comme paramètres du modèle (6.1) : $a = 4$ cm, $b = 3.5$ cm, $c = 10$ cm, $\theta_x = \pi/18$, $\theta_y = -\pi/9$, $\theta_z = 0$, $\phi_e = 0$, $r = 13$ cm, et les coordonnées du centre de l'ellipsoïde dans le repère du cylindre sont $[-r/2 \ 0 \ 0]$; la surface projetée de l'ellipsoïde pour ces valeurs de paramètres et l'azimut $\phi_a = 0$ est représentée dans la figure 6.13 (a), et la distance en fonction de l'azimut avec tous les autres paramètres fixés est représentée dans la figure 6.13 (b).

Ainsi, si l'on note y_i , $i = 1, \dots, n$, les valeurs de puissance absorbée dans le fœtus, obtenues avec des simulations de dosimétrie numérique, associées aux valeurs x_i , $i = 1, \dots, n$, de l'azimut du rayon incident, et que $f(x)$ représente la fonction (6.1) avec les valeurs des autres paramètres fixées comme nous venons de les énoncer, pour estimer α et β par la méthode des moindres carrés on les cherche tels qu'ils minimisent la quantité :

$$\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 \quad (6.6)$$

Pour que le problème (6.6) soit plus simple à résoudre, on passe au logarithme ; l'objectif est alors de minimiser $\sum_{i=1}^n (\log(y_i) - \log(f(x_i)))^2$, ce qui est réalisé pour :

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^n d(x_i) \log\left(\frac{S(x_i)}{y_i}\right) - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \log\left(\frac{S(x_i)}{y_i}\right)\right) \left(\sum_{i=1}^n d(x_i)\right)}{\sum_{i=1}^n d(x_i)^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n d(x_i)\right)^2},$$

avec $y_i \neq 0$ pour tout $i = 1, \dots, n$

$$\hat{\alpha} = \exp \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\hat{\beta} d(x_i) - \log\left(\frac{S(x_i)}{y_i}\right) \right).$$

L'application numérique donne ici $\alpha = 5.70 \times 10^{-9}$ et $\beta = 0.07$. Nous pouvons représenter les résultats du modèle (6.1) et les vraies valeurs de la puissance dans la figure 6.13 (c). Si nous comparons les deux courbes, nous voyons que notre modèle ne suit pas exactement les variations de la puissance absorbée mesurée. Nous pourrions tenter d'obtenir un modèle plus fidèle en essayant de modifier les valeurs des coordonnées du centre de l'ellipsoïde, ou des angles de rotation de l'ellipsoïde ; cependant cette recherche par tâtonnements (que nous avons essayée et très vite abandonnée) risque fort de s'avérer vaine puisque, comme nous l'avons déjà fait remarquer, un fœtus n'est pas un ellipsoïde parfait, et même, dans le cas de notre exemple, ses jambes sont tendues. Nous n'essayons pas ici de reproduire les valeurs obtenues pour un modèle de femme enceinte donné ; nous voulons un modèle simplifié pour calculer la puissance absorbée dans le fœtus qui soit justifié d'un point de vue physique, et c'est bien ce que nous avons ici.

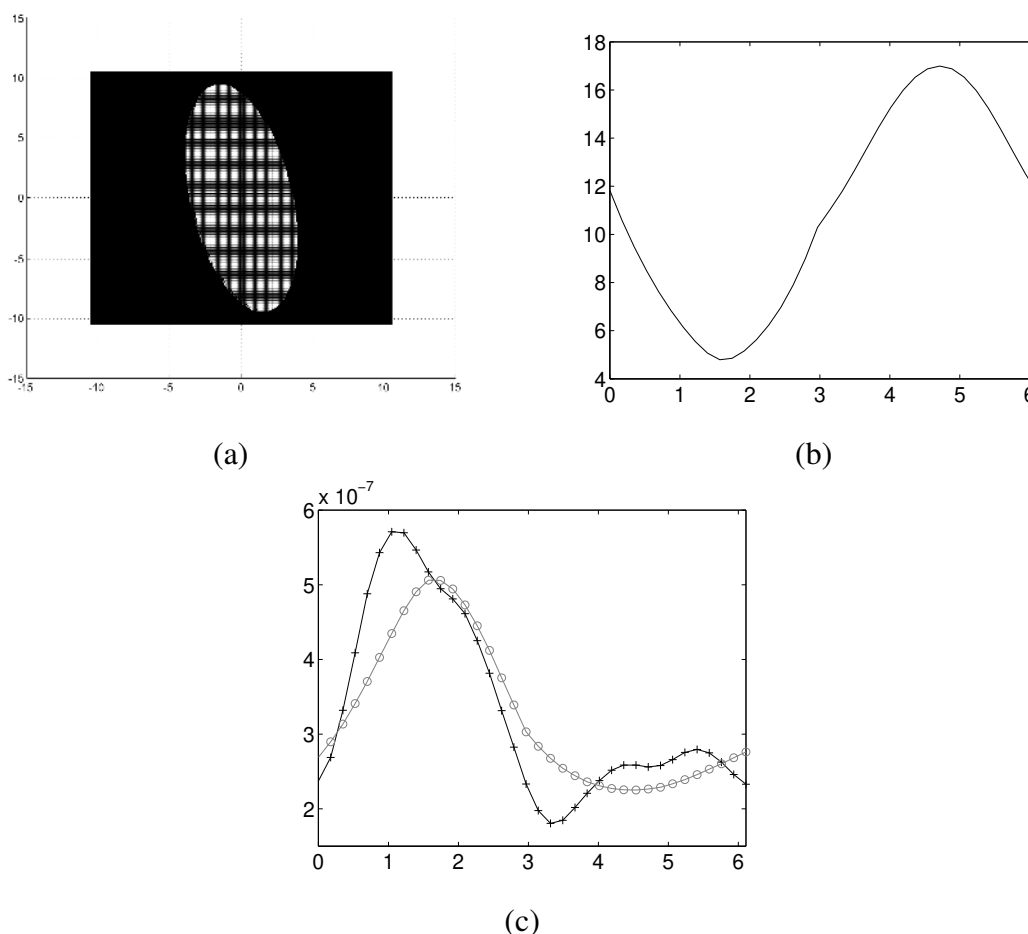


FIGURE 6.13 – (a) Surface projetée de l'ellipsoïde approximant le modèle du fœtus japonais, pour l'azimut 0. (b) Distance en fonction de l'azimut du rayon incident pour cette même approximation. (c) Comparaison entre les valeurs de puissance absorbée dans le fœtus obtenues par dosimétrie numérique (croix noires) et celles données par notre modèle (6.1) (cercles gris) .

Application des méthodes

Dans la suite, nous allons considérer f comme une fonction de 4 paramètres uniquement. Les premiers sont, comme pour l'exemple de la femme enceinte japonaise, l'azimut et l'élévation du rayon incident. Les deux autres sont les rotations de l'ellipsoïde, autour de son axe x , et autour de son axe y . Comme nous faisons l'hypothèse que les rotations sont uniformément distribuées, nous choisissons de petites tailles pour les demi-axes de l'ellipsoïde (2, 1.25 et 5 centimètres); en effet, on sait que seuls les fœtus à un stade peu avancé de développement peuvent tourner dans tous les sens : au fur et à mesure de leur croissance, ils se retournent de moins en moins, ce qui nous conduit à faire le choix d'un ellipsoïde(-fœtus) de petite taille pour que notre modélisation reste réaliste. Nous fixons $\alpha = 5.70 \times 10^{-9}$ et $\beta = 0.07$, le rayon du cylindre à 13 centimètres et le centre de l'ellipsoïde est positionné comme représenté dans la figure 6.11.

Comme pour les applications précédentes, nous nous intéressons à l'estimation du quantile à 95% de la distribution de f . Nous commençons par évaluer $\tilde{Q}_{0.95}$ avec un ensemble de 10^5 observations; $\tilde{Q}_{0.95} = 8.6808 \times 10^{-4}$. Nous commençons avec 10 points choisis au hasard parmi une grille A de 5000 points appartenant à $\left[\frac{\pi}{4}; \frac{3\pi}{4}\right] \times [0; 2\pi]^3$.

Nous lançons les stratégies GPS et GPS+ en utilisant les trois fonctions introduites lors du chapitre 3 pour la structure de covariance $k(\cdot, \cdot)$ du processus gaussien : la covariance gaussienne définie dans (3.9) et les fonctions de covariance de Matérn définies dans (3.12) avec $\nu = 3/2$ et $\nu = 5/2$, sous leur forme anisotrope. Ainsi nous noterons ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 et ℓ_4 les hyperparamètres à estimer comme décrit dans la Partie 5.4 du chapitre 5. Les erreurs relatives pour les différents estimateurs du quantile sont représentées dans la figure 6.14 (a) et 6.14 (b) pour GPS et GPS+ respectivement. À partir de ces courbes, on peut voir que les deux stratégies permettent d'obtenir de meilleurs résultats lorsque la fonction de covariance gaussienne est utilisée.

Nous représentons dans la figure 6.14 (c) et 6.14 (d) les estimations des quantiles $\hat{q}_{0.95,t}$, $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$, pour la stratégie GPS+, en utilisant le noyau gaussien comme structure de covariance du processus gaussien. On peut voir qu'avec 600 évaluations de la fonction f , on obtient une erreur de 2% par rapport à la valeur de $\tilde{Q}_{0.95}$ calculée avec 10^5 évaluations de f . Ainsi, on constate une fois de plus que l'application de nos méthodes adaptatives nous a permis de réaliser beaucoup moins d'évaluations de f pour obtenir une estimation très précise du quantile à 95%.

La figure 6.15 représente les estimations des hyperparamètres ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 et ℓ_4 . Ici nous avons choisi de ne représenter les résultats que dans le cas où nous avons utilisé la fonction de covariance gaussienne pour notre a priori de processus gaussien. Les valeurs estimées au fil des itérations de la méthode GPS se trouvent dans la figure 6.15 (a) et (b). Sur le graphe (a), on peut voir que les premières estimations du paramètre ℓ_3 sont beaucoup trop élevées, et ce jusqu'à plus de 200 itérations. Pour que cela soit plus lisible, on agrandit la figure entre 200 et 700 itérations sur la figure 6.15 (b), ce qui nous permet de constater que les valeurs de cet hyperparamètre se stabilisent autour de 0.1 après 300 itérations. On remarque également qu'après environ 320 itérations, toutes les estimations semblent avoir convergé, sauf celles du paramètre ℓ_1 qui continue de décroître. Ces résultats font écho à ceux représentés par la courbe en trait noir gras de la figure 6.14 (a), où l'on voit que l'erreur relative sur l'estimation du quantile est très instable jusqu'à 320 itérations, puis ses variations sont moins grandes. Ainsi tant que les estimations des hyperparamètres sont mauvaises, l'estimation du quantile ne peut pas être précise; ceci est une

évidence que cet exemple nous permet de constater une fois de plus.

Les valeurs estimées au fil des itérations de la méthode GPS+ sont représentés dans la figure 6.15 (c) et (d). Sur le graphe (c), on remarque tout d'abord que dans ce cas on observe des valeurs moins grandes que celles obtenues lors de l'application de la méthode GPS. Néanmoins dans ce cas les estimations se stabilisent après un nombre d'itérations plus important. En effet, dans la figure 6.15 (d) qui est l'agrandissement de (c) entre 300 et 700 itérations, on voit que, si les valeurs des estimations de ℓ_2 et ℓ_3 semblent avoir convergé vers une valeur proche de 0.1, ce n'est pas le cas des deux autres hyperparamètres. Ainsi on observe que l'estimation de ℓ_1 connaît de petites variations entre 0.4 et 0.5 et ne se stabilise qu'après 800 itérations à une valeur proche de 0.45. Enfin la valeur de l'estimation du paramètre ℓ_4 chute brutalement (de 0.8 à 0.3) peu avant 500 itérations, puis elle continue de décroître plus lentement avant de se stabiliser après 900 itérations à une valeur d'environ 0.18. De la même manière que précédemment, on peut rapprocher ces graphes de la courbe en trait noir gras de la figure 6.14 (b), où l'on n'observe pas de diminution de l'erreur relative avant 500 itérations.

Cet exemple en dimension $d = 4$ nous permet de constater que le nombre de points à observer pour estimer un quantile est grand par rapport à ce qui est envisageable dans le cas de vraies simulations de dosimétrie numérique. Plus le problème est complexe, plus le nombre d'observations de la fonction à estimer doit être important pour obtenir une estimation fiable des hyperparamètres de la covariance, qui influent directement sur la qualité de notre métamodèle et donc de notre estimation du quantile.

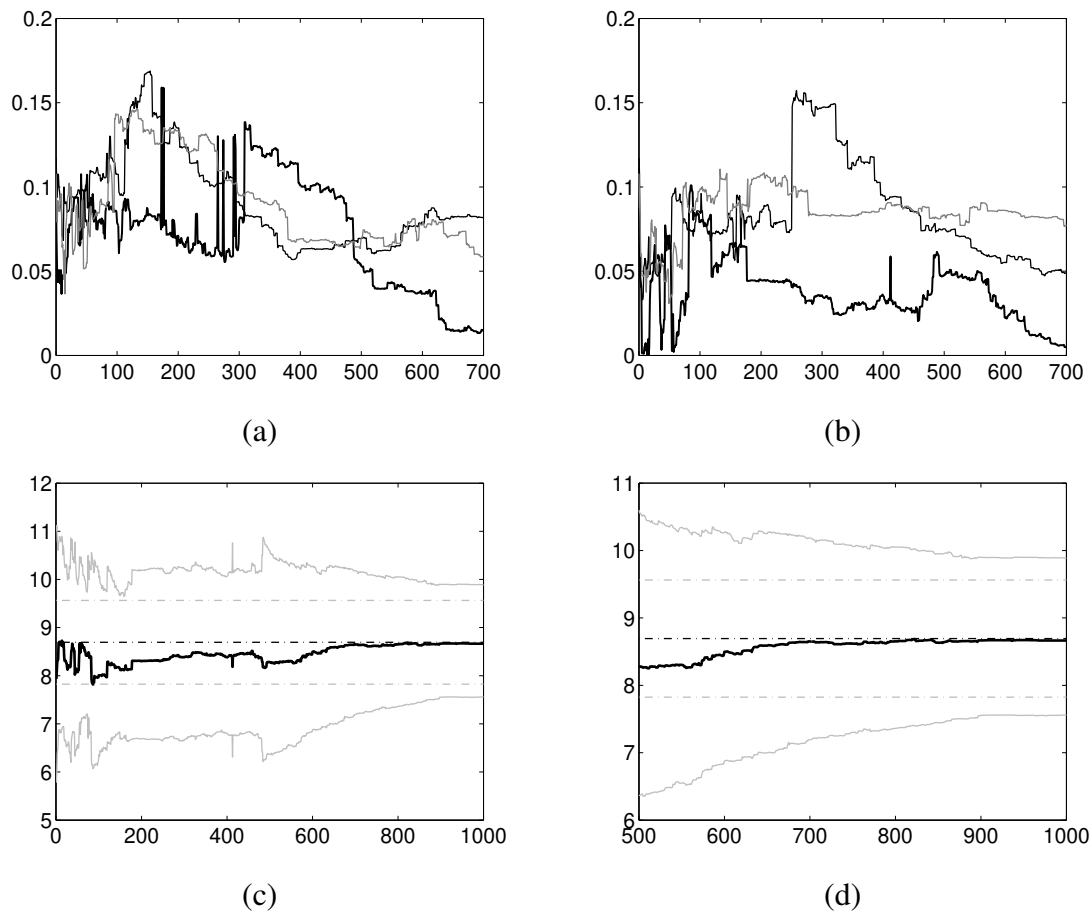


FIGURE 6.14 – (a) et (b) : erreurs relatives à chaque itération pour les méthodes GPS (a) et GPS+ (b), pour comparer les résultats du noyau gaussien (trait noir gras), et les noyaux de Matérn de paramètre $\nu = 3/2$ (trait noir) et de paramètre $\nu = 5/2$ (trait gris clair) comme fonction de covariance du prior ; (c) Estimations de $\hat{q}_{0.95,t}$ (trait noir gras), $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$ (bornes supérieure et inférieure, en gris clair) à chaque itération pour la méthode GPS+, et $\tilde{Q}_{0.95}$ (trait noir :'-') et $\tilde{q}_{0.95} \pm 10\%$ (traits gris clair '-.-') ; (d) Zoom de (c).

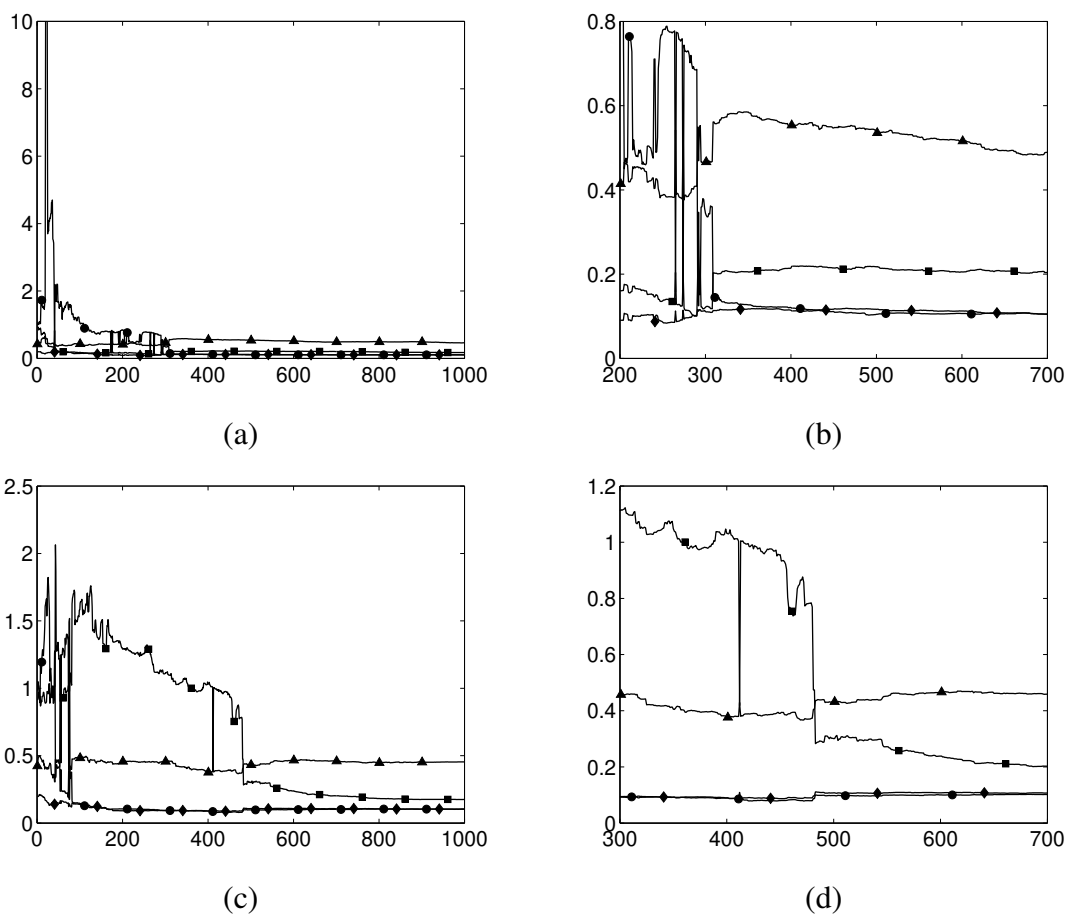


FIGURE 6.15 – Estimation de l_1 (triangle), l_2 (losange), l_3 (disque) et l_4 (carré). (a) Application de la méthode GPS ; (b) zoom de (a) ; (c) application de la méthode GPS+ ; (d) zoom de (c).

6.2 Exposition à une source proche

Dans cette partie, nous allons présenter une application de notre méthode GPS+ pour évaluer le DAS dans le cerveau d'un fœtus de 31 semaines inséré dans le modèle de femme enceinte Victoria, présenté lors du chapitre 2. Ici le modèle sera exposé à une source proche, en l'occurrence un modèle de tablette tactile, ce qui est une application nouvelle car les études de dosimétrie menées précédemment n'ont pris en compte que le cas de l'onde plane (cf : l'état de l'art sur l'exposition des fœtus présenté dans le chapitre 2, partie 2.1) . Nous sommes donc dans un cas différent de celui présenté dans la partie précédente, où l'on ne travaillera plus en fonction de l'angle du rayon incident, mais selon la position de la source, qui sera entre les mains de la mère assise pour plus de réalisme. Ainsi le DAS dans le cerveau du fœtus sera considéré comme une fonction de 3 paramètres : la hauteur de la tablette (plus ou moins proche des jambes de la mère), sa distance par rapport au ventre, et son inclinaison. Nous nous plaçons donc dans un cadre réaliste d'une femme enceinte assise utilisant une tablette tactile, la tenant plus ou moins proche d'elle et l'inclinant plus ou moins pour pouvoir lire sur l'écran. À notre connaissance aucune étude de dosimétrie numérique n'a pour le moment été menée dans un cas similaire (et nous n'aurons donc aucune valeur à laquelle nous comparer).

Cette application étant beaucoup plus complexe à mettre en place en termes de simulations, nous ne sommes pas en mesure de calculer un quantile de référence comme pour l'exemple précédent. Nous choisissons de faire appel à la méthode GPS+ car pour ces premières simulations nous préférons ne pas nous limiter à une grille fixe ; de plus, nous avons vu dans la partie précédente que cette méthode a été la plus performante sur le modèle jouet en dimension 4. Avant de décrire plus en détails notre application et de donner les résultats, nous présentons brièvement le modèle de la tablette (qui reproduit une tablette de la marque Samsung) et les modalités de calcul du DAS dans ce cas particulier. Notons que, dans la suite, nous allons travailler à la fréquence de 1940 MHz, qui correspond à la voix montante de la 3G (lorsque la tablette se connecte au réseau).

6.2.1 La tablette Samsung

Le modèle de tablette que nous utilisons ici reproduit une tablette de la marque Samsung ; il est représenté sur la figure 6.16. Ce modèle n'a pas été construit à l'identique du modèle commercial, comme ce qui peut être fait avec des modèles CAO (créés par Conception Assistée par Ordinateur). Ici l'objectif est de disposer d'un modèle simplifié compatible avec le code de calcul (FDTD) et validé en termes de rayonnement et de DAS par des mesures en chambre anéchoïque (une salle d'expérimentation dont les parois absorbent les ondes électromagnétiques, afin de reproduire les conditions de champ libre pour de ne pas perturber les mesures).

Lorsque l'on utilise une source proche comme un téléphone, un ordinateur portable, ou, dans notre cas, une tablette, le DAS que nous calculons dans les tissus après une simulation de dosimétrie numérique doit être normalisé par rapport à la puissance injectée dans l'appareil émetteur. Cette valeur dépend de la puissance réellement émise par l'amplificateur mais aussi du couplage à l'antenne. Comme nous n'avons pas accès à cette valeur, les valeurs de DAS seront normalisées par la valeur de puissance qu'il faudrait injecter dans l'antenne pour que le $DAS_{10g,IEEE}$ (le DAS

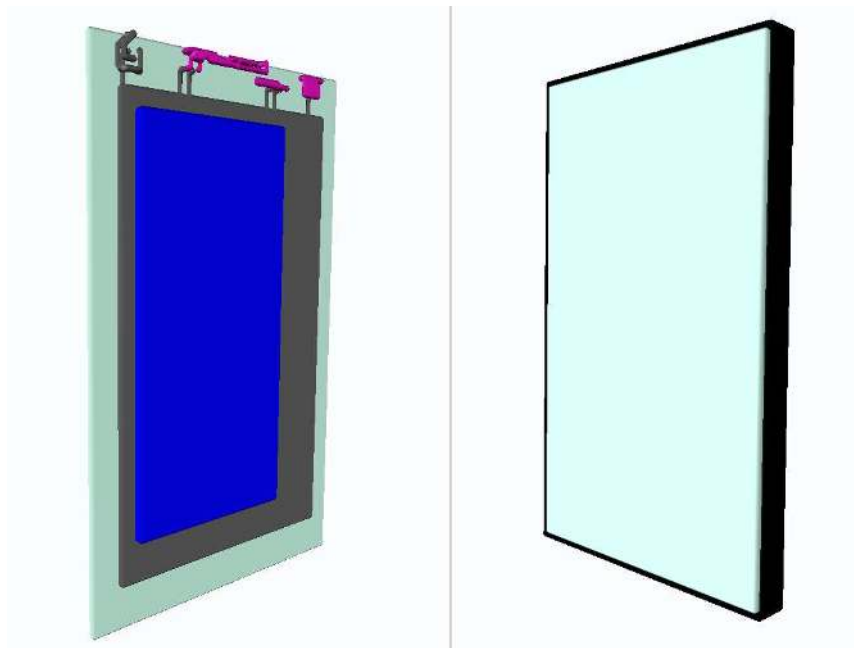


FIGURE 6.16 – Tablette Samsung Galaxy ; à gauche la vue intérieure avec en rose les antennes, en gris le PCB (l'ensemble des circuits imprimé), en bleu la batterie et en bleu clair l'écran.

moyenné sur 10 grammes de tissus homogène, selon les normes IEEE) vaille 1 W.kg^{-1} dans un fantôme plan. Un fantôme plan correspond à un modèle très simplifié, de la forme d'un parallélépipède rectangle ou d'un cube, qui aura les propriétés diélectriques du liquide équivalent de l'IEC¹ (*International Electrotechnical Commission* ; nous en avons déjà parlé lors du chapitre 2, partie 2.2).

Pour calculer cette valeur, on va placer la tablette près d'un cube (de taille $40 \times 40 \times 40 \text{ cm}^3$ dans notre cas) comme on peut le voir sur la figure 6.17 ; l'antenne de la tablette est située sur le côté le plus proche du cube. Ce cube aura les mêmes propriétés diélectriques que le tissu équivalent que nous utiliserons pour les tissus indifférenciés du fœtus ; rappelons que la fréquence utilisée ici est de 1940 MHz. Une simulation FDTD avec ce modèle nous permet d'évaluer le $\text{DAS}_{10\text{g}}^{\text{IEEE}}$ (qui vaut $2.3774 \times 10^{-8} \text{ W.kg}^{-1}$) et la puissance injectée qui a permis d'obtenir cette valeur (qui vaut ici $2.0679 \times 10^{-8} \text{ W}$). Ainsi notre puissance de normalisation vaut 0.8698 W. Quand nous aurons évalué une valeur de DAS dans un tissu du fœtus ainsi que la puissance injectée dans la tablette qui a permis d'obtenir cette valeur, il faudra donc multiplier le DAS par le rapport entre la puissance de normalisation et la puissance injectée pour avoir notre valeur de DAS normalisée.

Lorsque la tablette sera placée près du modèle Victoria enceinte, le côté où se situe l'antenne sera celui qui est le plus proche du ventre et donc du fœtus.

¹<http://www.iec.ch/>

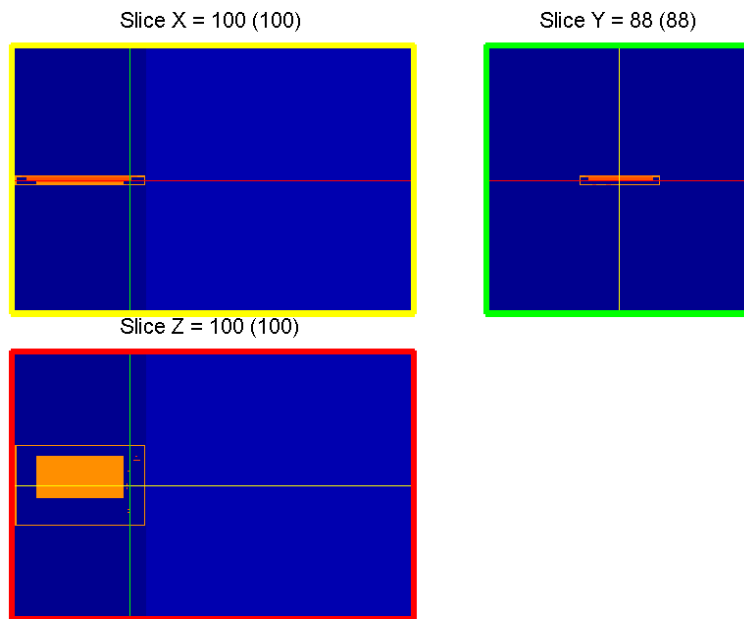


FIGURE 6.17 – Tablette placée près d’un cube.

6.2.2 Exposition de Victoria et d’un fœtus de 31 semaines

Appliquons maintenant notre méthode GPS+ à l’estimation du quantile à 95% du DAS dans le cerveau du fœtus. Même si nous avons pu observer lors de l’application avec le modèle de la femme enceinte japonaise exposé à une onde plane que l’estimation du quantile à 95% du DAS nécessitait plus d’observations dans le cas du cerveau que dans le cas du corps entier du fœtus (en moyenne 65 observations au total contre 35 pour obtenir à peu près le même niveau d’erreur), nous choisissons de nous intéresser en particulier au DAS dans le cerveau du fœtus car cette quantité devrait connaître des variations plus grandes que celle du corps entier du fœtus dans ce cas (sans parler du fait que le cerveau est un organe important).

Avant de réaliser les simulations de dosimétrie numérique, il nous faut positionner le modèle Victoria assis avec la tablette entre les mains. Auparavant, le fœtus de 31 semaines aura été inséré dans le modèle dans la position souhaitée (tête en bas dans notre cas). Nous aurions pu envisager d’ajouter la rotation du fœtus comme paramètre du DAS, mais cela s’avère être trop compliqué. En effet, l’insertion du fœtus est longue et complexe : si le logiciel Fetus Framework (développé par Télécom ParisTech) permet d’automatiser en partie ce processus, c’est un outil très récent (développé dans le cadre du projet Fetus) qui n’est pas encore finalisé ; il faut donc vérifier que l’insertion du fœtus a été réalisée correctement et utiliser les applications de déformation de la plateforme SOFA pour corriger d’éventuels problèmes (un membre du fœtus qui dépasse du ventre de la mère, par exemple). Nous avons donc décidé d’utiliser un modèle fixé, avec la tête en bas ; cela reste réaliste car le fœtus est âgé de 31 semaines, et on sait que plus le terme approche, moins le fœtus aura tendance à se retourner dans tous les sens. Certes il va bouger ses membres,

mais nous n'avons pas la possibilité de le faire ici, et cela devrait avoir une influence limitée sur l'exposition.

Pour asseoir le modèle de Victoria enceinte et placer ses mains autour de la tablette, nous avons travaillé avec le logiciel de déformation Poser. Cette tâche est fastidieuse car il faut que ses mains soient bien proches de la tablette, sans pour autant réellement la toucher car cela pourrait poser des problèmes lors des simulations de dosimétrie numérique des émissions de la tablette. À ce stade le modèle est comme sur la partie gauche de la figure 6.18.

Une fois que le modèle est prêt et la tablette placée, on peut enfin lancer la simulation FDTD, qui dure de 6 à 8 heures, pour n'obtenir qu'une seule valeur du DAS dans le cerveau du fœtus.

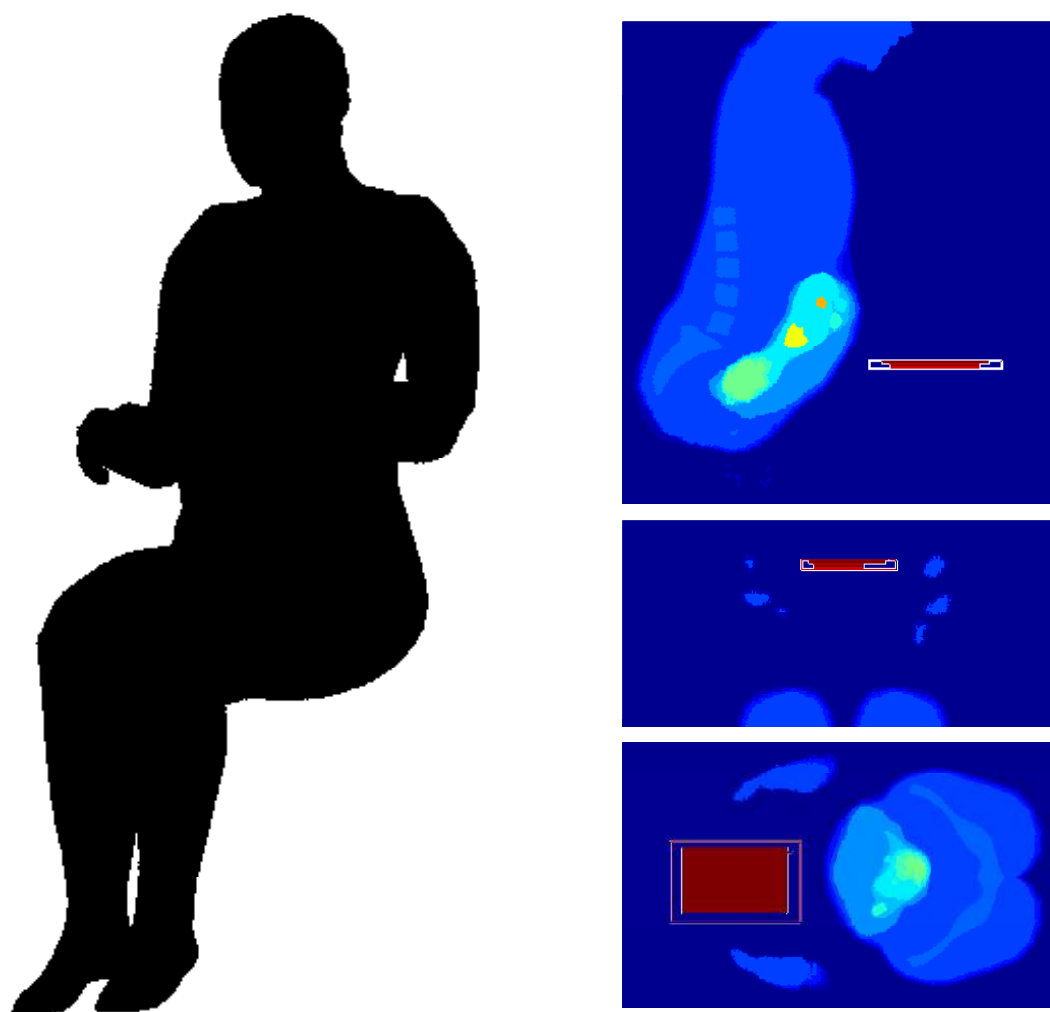


FIGURE 6.18 – Représentation du modèle assis en 3D et coupes de profil, de face et de dessus pour montrer un placement de la tablette

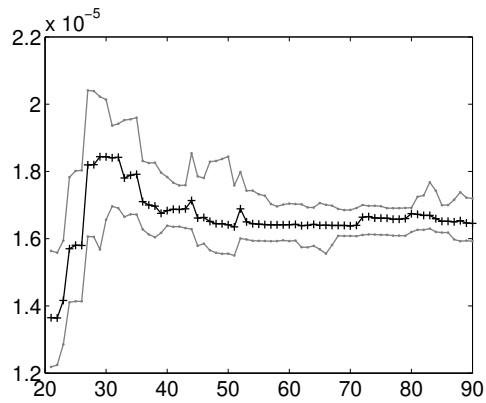
Pour appliquer notre méthode GPS+ à l'estimation du quantile à 95% du DAS dans le cer-

veau du fœtus, nous commençons par réaliser 20 évaluations du DAS aux points d'un LHS. Puis nous lançons la méthode. Les résultats sont représentés sur la figure 6.19 : les quantiles estimés à chaque itération sont représentés sur la figure (a), et les estimations de ℓ_1 , ℓ_2 et ℓ_3 sont représentées sur la figure (b). On voit que l'estimation de ℓ_3 ne converge pas avant l'ajout d'une cinquantaine de points par la méthode ; on ne peut donc pas se fier aux estimations du quantile avant. Finalement, après 90 observations, on estime le quantile du DAS dans le cerveau du fœtus à $1.645 \times 10^{-5} \text{ W.kg}^{-1}$, avec un intervalle de confiance de $[1.592 \times 10^{-5}; 1.719 \times 10^{-5}] \text{ W.kg}^{-1}$ sur cette estimation, soit moins de 5% sur la valeur du quantile estimé. Ainsi, même si les estimations des hyperparamètres ne sont pas encore parfaites, il nous semble possible d'arrêter les simulations à ce stade.

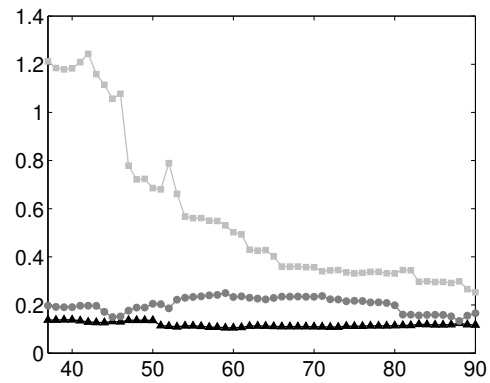
Dans la figure 6.19 (c) nous avons représenté les points où les observations ont été effectuées (même s'il est difficile de bien voir, et qu'en affichant les numéros comme pour les exemples précédents en dimension 2 sur les graphes de contour, le graphe devenait illisible). bien qu'il ne soit pas possible de tracer une estimation du DAS dans le cerveau du fœtus, remarquons que l'on peut tout de même imaginer la forme de cette fonction grâce aux valeurs des hyperparamètres ℓ_1 , ℓ_2 et ℓ_3 . Ainsi, ℓ_1 ayant la valeur la plus faible, on sait que c'est selon le paramètre "hauteur de la tablette" que l'on va observer le plus de variations du DAS. Au contraire, les variations selon l'angle d'inclinaison de la tablette seront moins importantes.

Dans la figure 6.19 (c), la hauteur est en nombre de voxels, car c'est ce qu'on a utilisé pour placer la tablette avant d'effectuer la simulation FDTD. Le maillage est de 2 mm, mais plus simplement, la position la plus basse est proche des cuisses, et la plus élevée est 25.6 cm plus haut. Quant à la distance au ventre, plus le nombre de voxels est grand, plus on est proche du ventre, c'est-à-dire à 2 cm dans notre cas (et 10.6 cm plus loin pour la position la plus éloignée). Enfin, l'angle d'inclinaison de la tablette varie de 0 à 20 degrés. Sur cette figure, on peut voir que les positions de tablette pour lesquelles les simulations ont été effectuées sont celles plutôt basses, proches du ventre, pour plusieurs valeurs d'angles possibles. Le fait que, au fil des itérations, les observations ont été réalisées pour des valeurs différentes d'angles, permet de comprendre comment l'estimation de ℓ_3 s'est précisée (comme nous avons pu l'observer sur la figure 6.19 (b)), car c'est cet hyperparamètre qui est associé au paramètre d'inclinaison de la tablette. D'autre part, étant donné que le fœtus est placé la tête en bas, et que, plus la source est proche, plus l'absorption est importante, ces résultats montrent que la méthode qui cherche à évaluer le quantile à 95% a bien sélectionné les observations de façon à rechercher les hautes valeurs du DAS dans le cerveau du fœtus.

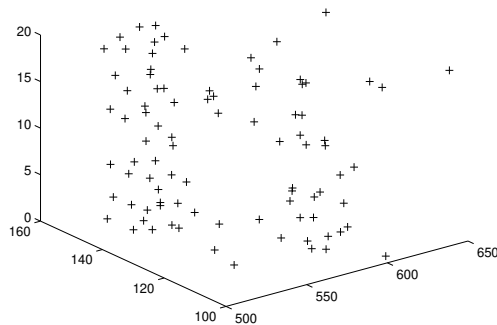
En résumé, l'ordre de grandeur de la valeur du quantile estimée ici est cohérente avec les valeurs que nous avons obtenues pour le DAS dans le cerveau du fœtus de 26 semaines exposé à une onde plane (l'exemple précédent). Au vu de tous ces résultats, nous pouvons en déduire que cette application a été concluante.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 6.19 – (a) Quantiles estimés avec la méthode GPS+ en fonction du nombre d’observations : $\hat{q}_{0.95,t}$, $\hat{q}_{0.95,t}^U$ et $\hat{q}_{0.95,t}^L$. (b) Estimations de l_1 (triangles noirs), l_2 (ronds gris) et l_3 (carrés gris clair) en fonction du nombre d’observations. (c) Coordonnées des points où les observations ont été effectuées : l’axe des abscisses (de 500 à 650) représente la hauteur de la tablette et l’axe des ordonnées (de 100 à 160) la distance par rapport au ventre (en numéro de voxel), et enfin l’angle en degré sur l’axe gradué de 0 à 20.

Chapitre 7

Discussion et perspectives

Nous avons présenté ici deux nouvelles méthodes séquentielles, nommées GPS et GPS+, pour l'estimation d'un quantile d'une variable aléatoire réelle $Y = f(X)$, où X est un vecteur aléatoire dans \mathbb{R}^d dont la distribution est supposée connue, et f est une fonction à valeurs réelles, très coûteuse à évaluer. GPS et GPS+, ont été comparées à deux autres stratégies séquentielles, l'une adaptée de la méthode SUR (voir [Bect et al., 2012]), et l'autre d'une méthode pour l'estimation d'un contour (voir [Ranjan et al., 2008]) que nous avons nommée RBM. Toutes ces méthodes sont fondées sur la modélisation de f par une trajectoire de processus gaussien, et ont pour objectif d'estimer le quantile de $Y = f(X)$ en utilisant le moins d'évaluations possibles de la fonction f . Si les performances des quatre méthodes sont comparables, nos applications à des données synthétiques ont montré que la stratégie SUR pour le quantile est trop coûteuse pour un modèle de dimension supérieure à deux, et que le comportement de la méthode RBM dépend du choix d'un paramètre β qu'il faut fixer alors que, dans le cas de données réelles, nous n'aurons pas la possibilité de réaliser plusieurs essais avant de le choisir (notons que les auteurs n'ont pas émis de recommandations sur le choix de β).

Pour sélectionner les points à ajouter au fur et à mesure à l'ensemble des observations, nos méthodes GPS et GPS+ utilisent un critère fondé sur des bornes de confiance qui nous ont été inspirées par [Srinivas et al., 2012] et [de Freitas et al., 2012]. Ce type de critère est très simple à implémenter et ne pose pas de problème particulier d'un point de vue computationnel. De plus, GPS et GPS+ s'avèrent très efficaces pour fournir des estimations précises du quantile en utilisant peu d'évaluations de la fonction f . Nous les avons donc appliquées avec succès à des données réelles, c'est-à-dire à l'évaluation de l'exposition de fœtus à des outils de télécommunication sans fil (au moyen de simulations de dosimétrie numérique), dans le cadre du projet ANR-JST Fetus.

Ces résultats de dosimétrie numérique sont nouveaux dans le domaine. D'une part, notre application à l'exposition d'un fœtus à une onde plane, en fonction de l'azimut et l'élévation du rayon incident, nous a permis de voir les variations du DAS (dans le corps entier et dans le cerveau du fœtus) selon ces paramètres ; nous rappelons que les études de dosimétrie précédentes ne prenaient en compte que le rayon d'incidence frontale. D'autre part, l'exposition d'un fœtus à une tablette tactile est une application nouvelle, d'autant plus qu'ici nous avons considéré le DAS dans le cerveau du fœtus comme une fonction de la position de la tablette. Cette approche

correspond mieux à un usage réel (la mère, assise, peut tenir sa tablette plus ou moins proche d'elle, plus ou moins inclinée, plus ou moins proche de ses yeux), et donc à notre objectif qui est d'évaluer le niveau d'exposition réel du cerveau du fœtus, qu'une approche de type "pire-cas" qui où l'on se contenterait de placer la tablette le plus près possible de la femme enceinte au niveau du cerveau du fœtus.

Une contribution supplémentaire de ce travail au projet Fetus vient du fait que nous avons validé l'utilisation pour la dosimétrie numérique d'un modèle de femme enceinte synthétique semi-homogène. Ce modèle synthétique, que nous utilisons dans notre application avec la tablette tactile, est pratique par rapport aux modèles hétérogènes pour lesquels l'insertion d'un modèle de fœtus nécessite de déformer les organes internes de la mère. Enfin, le modèle géométrique simplifié, que nous avons mis en place pour décrire de façon schématique l'exposition d'un fœtus à une onde plane, pourra être utilisé chez Orange pour tester d'autres méthodes pour l'estimation d'une fonctionnelle ou de toute la distribution de $Y = f(X)$ (fondées sur le chaos polynomial, par exemple).

Le travail que nous avons réalisé pourrait être complété par de nouvelles applications à l'évaluation d'un quantile du DAS dans le corps entier ou dans le cerveau du fœtus. En effet, des modèles de fœtus et des outils de déformation des modèles ont été développés en parallèle à cette thèse par les différents partenaires du projet Fetus ; on peut citer par exemple un outil développé par Télécom ParisTech, qui permet de générer des modèles de fœtus entre 14 et 32 semaines d'aménorrhée, dans une position choisie. Une application possible serait alors de suivre l'exposition d'un même fœtus tout au long d'une grossesse. De plus, de nouveaux modèles de sources ont été développés par Orange pour mieux correspondre aux nouveaux usages des outils de télécommunication sans fil, ce qui permet d'envisager encore plus d'applications.

En ce qui concerne nos méthodes séquentielles de planification d'expériences numériques, on peut envisager de les modifier pour qu'elles soient adaptées à un modèle de la forme $Y = f(X) + \epsilon$. En effet, même si le choix de la modélisation $Y = f(X)$ paraît adapté à des expériences numériques sur lesquelles on n'observe pas d'erreur (reproduire deux fois la même expérience conduira exactement au même résultat), des articles tels que [Gramacy and Lee, 2012] soutiennent que l'estimation d'un "nugget" ϵ confère de meilleures propriétés statistiques au métamodèle, qui serait alors d'une meilleure qualité prédictive.

D'autre part, lors de nos applications, nous avons eu l'occasion d'observer qu'une estimation erronée des hyperparamètres (ce qui arrive souvent au lancement d'une méthode séquentielle, lorsque l'on dispose de très peu d'observations) n'avait pas altéré les performances de nos méthodes, le quantile étant finalement estimé avec peu d'itérations ; néanmoins, nous avons également vu que les bornes de confiance sur l'estimation du quantile ne sont pas fiables tant que l'estimation des hyperparamètres est très éloignée de la réalité. Une piste éventuelle pour résoudre ce problème serait d'adopter un point de vue complètement bayésien, c'est-à-dire de faire l'hypothèse d'une loi a priori pour les hyperparamètres, au lieu de les estimer par la méthode du maximum de vraisemblance. On peut voir par exemple dans [Benassi et al., 2011] que l'approche bayésienne pour calculer le critère "expected improvement" (pour l'estimation du maximum de la fonction f ; voir [Vazquez and Bect, 2010]) s'avère plus robuste que l'estimation par maximum de vraisemblance.

Enfin, dans une optique de généralisation de nos travaux, on peut imaginer d'adapter GPS et

GPS+ pour estimer d'autres fonctionnelles de $Y = f(X)$, comme par exemple la moyenne, la variance, ou la fonction de répartition.

Bibliographie

- [Abramowitz and Stegun, 1965] Abramowitz, M. and Stegun, I. A., editors (1965). *Handbook of Mathematical Functions : with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables (Dover Books on Mathematics)*. Dover books on mathematics. Dover Publications.
- [Arnaud et al., 2010] Arnaud, A., Bect, J., Couplet, M., Pasanisi, A., and Vazquez, E. (2010). Évaluation d'un risque d'inondation fluviale par planification séquentielle d'expériences. In *42èmes Journées de Statistique*, Marseille, France, France.
- [Bect et al., 2012] Bect, J., Ginsbourger, D., Li, L., Picheny, V., and Vazquez, E. (2012). Sequential design of computer experiments for the estimation of a probability of failure. *Statistics and Computing*, 22(3) :773–793.
- [Benassi et al., 2011] Benassi, R., Bect, J., and Vazquez, E. (2011). Robust gaussian process-based global optimization using a fully bayesian expected improvement criterion. In *Learning and Intelligent Optimization*, pages 176–190, Roma, Italy. 5th International Conference, LION 5.
- [Berlinet and Thomas-Agnan, 2004] Berlinet, A. and Thomas-Agnan, C. (2004). *Reproducing Kernel Hilbert Spaces in Probability and Statistics*. Kluwer Academic Publishers.
- [Brochu et al., 2010] Brochu, E., Cora, V. M., and de Freitas, N. (2010). A tutorial on bayesian optimization of expensive cost functions, with application to active user modeling and hierarchical reinforcement learning. eprint arXiv :1012.2599, arXiv.org.
- [Chevalier et al., 2011] Chevalier, C., Bect, J., Ginsbourger, D., Vazquez, E., Picheny, V., and Richet, Y. (2011). Fast parallel kriging-based stepwise uncertainty reduction with application to the identification of an excursion set. Submitted to *Technometrics*.
- [Conil et al., 2011] Conil, E., Hadjem, A., Gati, A., Wong, M.-F., and Wiart, J. (2011). Influence of plane-wave incidence angle on whole body and local exposure at 2100 mhz. *Electromagnetic Compatibility, IEEE Transactions on*, 53(1) :48–52.
- [Conil et al., 2008] Conil, E., Hadjem, A., Lacroux, F., Wong, M. F., and Wiart, J. (2008). Variability analysis of sar from 20 MHz to 2.4 GHz for different adult and child models using finite-difference time-domain. *Physics in Medicine and Biology*, 53(6) :1511–1525.

- [de Crécy et al., 2008] de Crécy, A., Bazin, P., Glaeser, H., Skorek, T., J., J., Probst, P., Fujioka, K., Chung, B., Oh, D., Kyncl, M., Pernica, R., Macek, J., Meca, R., and Macian, R. (2008). Uncertainty and sensitivity analysis of the loft I2-5 test : Results of the bemuse programme. *Nuclear Engineering and Design*, 12(238) :3561–3578.
- [de Freitas et al., 2012] de Freitas, N., Smola, A. J., and Zoghi, M. (2012). Regret bounds for deterministic gaussian process bandits. eprint arXiv :1203.2177, arXiv.org.
- [Dimbylow, 2006] Dimbylow, P. (2006). Development of pregnant female, hybrid voxel-mathematical models and their application to the dosimetry of applied magnetic and electric fields at 50 hz. *Physics in Medicine and Biology*, 51(10) :2383–2394.
- [Dimbylow, 2007] Dimbylow, P. (2007). Sar in the mother and foetus for rf plane wave irradiation. *Physics in Medicine and Biology*, 52(13) :3791–3802.
- [Dimbylow et al., 2008] Dimbylow, P. J., Hirata, A., and Nagaoka, T. (2008). Intercomparison of whole-body averaged sar in european and japanese voxel phantoms. *Physics in Medicine and Biology*, 53(20) :5883–5897.
- [El Habachi et al., 2010] El Habachi, A., Conil, E., Hadjem, A., Vazquez, E., Wong, M. F., Gati, A., Fleury, G., and Wiart, J. (2010). Statistical analysis of whole-body absorption depending on anatomical human characteristics at a frequency of 2.1 GHz. *Physics in Medicine and Biology*, 55(7) :1875–1887.
- [Forrester et al., 2008] Forrester, A., Sobester, A., and Keane, A. (2008). *Engineering design via surrogate modelling : a practical guide*. Wiley.
- [Gramacy and Lee, 2009] Gramacy, R. B. and Lee, H. K. (2009). Adaptive design and analysis of supercomputer experiments. *Technometrics*, 51(2) :130–145.
- [Gramacy and Lee, 2012] Gramacy, R. B. and Lee, H. K. (2012). Cases for the nugget in modeling computer experiments. *Statistics and Computing*, 22(3) :713–722.
- [Hansen, 2006] Hansen, N. (2006). The CMA evolution strategy : a comparing review. In Lozano, J., Larranaga, P., Inza, I., and Bengoetxea, E., editors, *Towards a new evolutionary computation. Advances on estimation of distribution algorithms*, pages 75–102. Springer.
- [Hansen and Ostermeier, 2001] Hansen, N. and Ostermeier, A. (2001). Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies. *Evolutionary Computation*, 9(2) :159–195.
- [Hirata et al., 2007] Hirata, A., Kodera, S., Wang, J., and Fujiwara, O. (2007). Dominant factors influencing whole-body average SAR due to far-field exposure in whole-body resonance frequency and GHz regions. *Bioelectromagnetics*, 28(6) :484–487.
- [ICNIRP, 1998] ICNIRP (1998). Guidelines for limiting exposure to time-varying electric, magnetic, and electromagnetic fields (up to 300 GHz). *Health Physics*, 74(4) :494–522.

- [Jala et al., 2013] Jala, M., Conil, E., Varsier, N., Wiart, J., Hadjem, H., Lévy-Leduc, C., and Moulines, E. (2013). Simplified pregnant woman models for the fetus exposure assessment. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences - Physique*, 5(14) :412–417.
- [Kawai et al., 2010] Kawai, H., Nagaoka, T., Watanabe, S., Saito, K., Takahashi, M., and Ito, K. (2010). Computational dosimetry in embryos exposed to electromagnetic plane waves over the frequency range of 10 mhz-1.5 ghz. *Physics in Medicine and Biology*, 55(1) :N1–N11.
- [Kientega et al., 2011] Kientega, T., Conil, E., Hadjem, A., Richalot, E., Gati, A., Wong, M., Picon, O., and Wiart, J. (2011). A surrogate model to assess the whole body SAR induced by multiple plane waves at 2.4 GHz. *Annals of Telecommunications*, 66 :419–428.
- [Krige, 1951] Krige, D. (1951). A statistical approach to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. *Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa*, 52(6) :119–139.
- [Lemieux, 2009] Lemieux, C. (2009). *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Sampling*. Springer Series in Statistics. Springer-Verlag, New York.
- [Matheron, 1971] Matheron, G. (1971). *The theory of regionalized variables and its applications*. École des Mines de Paris.
- [Mockus et al., 1978] Mockus, J., Tiesis, V., and Zilinskas, A. (1978). The application of bayesian methods for seeking the extremum. *Towards Global Optimization*, 2 :117–129.
- [Nagaoka et al., 2008] Nagaoka, T., Saito, K., Takahashi, M., Ito, K., and Watanabe, S. (2008). Anatomically realistic reference models of pregnant women for gestation ages of 13, 18, and 26 weeks. In *Proceedings of the 30th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, pages 2817–2820, Vancouver, British Columbia, Canada.
- [Nagaoka et al., 2007] Nagaoka, T., Togashi, T., Saito, K., Takahashi, M., Ito, K., and Watanabe, S. (2007). An anatomically realistic whole-body pregnant-woman model and specific absorption rates for pregnant-woman exposure to electromagnetic plane waves from 10 MHz to 2 GHz. *Physics in Medicine and Biology*, 52(22) :6731–6745.
- [Nagaoka et al., 2004] Nagaoka, T., Watanabe, S., Sakurai, K., Kunieda, E., Watanabe, S., Taki, M., and Yamanaka, Y. (2004). Development of realistic high-resolution whole-body voxel models of japanese adult males and females of average height and weight, and application of models to radio-frequency electromagnetic-field dosimetry. *Physics in Medicine and Biology*, 49(1) :1–15.
- [Neveu, 1968] Neveu, J. (1968). *Processus aléatoires gaussiens*. Séminaire de Mathématiques Supérieures, No. 34 (Été, 1968). Les Presses de l'Université de Montréal, Montreal, Que.
- [Oakley, 2004] Oakley, J. (2004). Estimating percentiles of uncertain computer code outputs. *Journal of the Royal Statistical Society : Series C (Applied Statistics)*, 53(1) :83–93.

- [Pérot and Iooss, 2008] Pérot, N. and Iooss, B. (2008). Quelques problématiques d'échantillonnage statistique pour le démantèlement d'installations nucléaires. In *Actes du 16ème Congrès de Maîtrise des Risques et de Sûreté de Fonctionnement*.
- [Ranjan et al., 2008] Ranjan, P., Bingham, D., and Michailidis, G. (2008). Sequential experiment design for contour estimation from complex computer codes. *Technometrics*, 50(4) :527–541.
- [Rasmussen and Williams, 2006] Rasmussen, C. E. and Williams, C. K. I. (2006). *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning)*. The MIT Press.
- [Rutherford, 2006] Rutherford, B. (2006). A response-modeling alternative to surrogate models for support in computational analyses. *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10 - 11) :1322 – 1330.
- [Sacks et al., 1989] Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J., and Wynn, H. P. (1989). Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science*, 4(4) :409–423.
- [Srinivas et al., 2012] Srinivas, N., Krause, A., Kakade, S., and Seeger, M. (2012). Information-theoretic regret bounds for gaussian process optimization in the bandit setting. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 58(5) :3250 –3265.
- [Stein, 1999] Stein, M. L. (1999). *Interpolation of spatial data*. Springer Series in Statistics. Springer-Verlag.
- [Taflove and Hagness, 2005] Taflove, A. and Hagness, S. (2005). *Computational Electrodynamics – The Finite-Difference Time Domain Method*. Artech House Antennas and Propagation Library. Artech House, 3rd revised edition edition.
- [Valentin, 2002] Valentin, J. (2002). Basic anatomical and physiological data for use in radiological protection : reference values : Icrp publication 89. *Annals of the ICRP*, 32(3–4) :1–277.
- [Vazquez and Bect, 2010] Vazquez, E. and Bect, J. (2010). Convergence properties of the expected improvement algorithm with fixed mean and covariance functions. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 140(11) :3088 – 3095.
- [Wiert et al., 2008] Wiert, J., Hadjem, A., Wong, M. F., and Bloch, I. (2008). Analysis of rf exposure in the head tissues of children and adults. *Physics in Medicine and Biology*, 53(13) :3681–3695.
- [Wilks, 1941] Wilks, S. (1941). Determination of sample sizes for setting tolerance limits. *The Annals of Mathematical Statistics*, 12(1) :91–96.
- [Xu et al., 2007] Xu, X. G., Taranenko, V., Zhang, J., and Shi, C. (2007). A boundary-representation method for designing whole-body radiation dosimetry models : pregnant females at the ends of three gestational period – rpi-p3, -p6 and -p9. *Physics in Medicine and Biology*, 52(23) :7023–7044.

[Zio and De Maio, 2008] Zio, E. and De Maio, F. (2008). Bootstrap and order statistics for quantifying thermal-hydraulic code uncertainties in the estimation of safety margins. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2008 :1–9.