



Petite Boîte à Outils de l'Aléatoire pour l'Étude des Codes Numériques Complexes

Fabrice Gamboa

Institut de Mathématiques de Toulouse
Université Paul Sabatier

26 mars 2009

Journées d'étude Météo-SMAI-IMT



Programme

1 Introduction

- Cadre : Boîte Noire
- Apport du Stochastique
- Techniques présentées
- Page de Pub
- Un modèle jouet pour s'amuser

2 Analyse de Sensibilité

- Méthodes déterministes
- Quelques notions de probabilités : Variables aléatoires
- Méthode de Sobol
- Estimation des Indices de Sobol
- Exemple du modèle jouet

3 Émulateur Gaussien

- Quelques notions de champs gaussiens
- Le Krigeage

4 Fin

Motivation-Exemples

Motivation-Exemples

- **Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation**

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- **Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....**

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- **Complexités :**

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- Complexités :
 - Gros Code : traitements numériques très divers, développés au fil du temps.

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- Complexités :
 - Gros Code : traitements numériques très divers, développés au fil du temps.
 - Nombreuses entrées : vectorielles, fonctionnelles, incertaines.

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- Complexités :
 - Gros Code : traitements numériques très divers, développés au fil du temps.
 - Nombreuses entrées : vectorielles, fonctionnelles, incertaines.
 - Nombreuses sorties : vectorielles, fonctionnelles.

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- Complexités :
 - Gros Code : traitements numériques très divers, développés au fil du temps.
 - Nombreuses entrées : vectorielles, fonctionnelles, incertaines.
 - Nombreuses sorties : vectorielles, fonctionnelles.
 - Execution couteuse- Exemple déchets nucléaires 3 jours CPU pour un jeu de paramètres.

Motivation-Exemples

- Notre objet d'étude : Code numérique compliqué de simulation
- Exemples: Météo, Océanographie, Process Physique et/ou Chimique Compliquée, Phénomènes Économiques....
- Complexités :
 - Gros Code : traitements numériques très divers, développés au fil du temps.
 - Nombreuses entrées : vectorielles, fonctionnelles, incertaines.
 - Nombreuses sorties : vectorielles, fonctionnelles.
 - Execution couteuse- Exemple déchets nucléaires 3 jours CPU pour un jeu de paramètres.
- **Besoin de méthodes pour y voir plus clair.**

Cadre : Boîte Noire

Cadre : Boîte Noire

Exposé d'aujourd'hui : entrée vectorielle et sortie scalaire

Y =sortie est un nombre et X =entrée est un vecteur de nombres

Cadre : Boîte Noire

Exposé d'aujourd'hui : entrée vectorielle et sortie scalaire

Y = sortie est un nombre et X = entrée est un vecteur de nombres

Modèle de type boîte noire

Cadre : Boîte Noire

Exposé d'aujourd'hui : entrée vectorielle et sortie scalaire

Y = sortie est un nombre et X = entrée est un vecteur de nombres

Modèle de type boîte noire



Cadre : Boîte Noire

Exposé d'aujourd'hui : entrée vectorielle et sortie scalaire

Y = sortie est un nombre et X = entrée est un vecteur de nombres

Modèle de type boîte noire

Modèle de régression non linéaire

$$Y = f(X).$$

Le code est modélisé par une fonction abstraite compliquée f

Apport du Stochastique

Apport du Stochastique

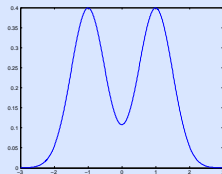
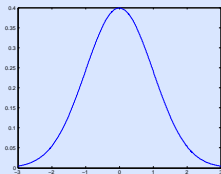
- **Prise en compte du caractère aléatoire de certaines composantes de X**

Apport du Stochastique

- Prise en compte du caractère aléatoire de certaines composantes de X
 - Mesures physiques entachées d'erreurs : Pression, température...
 - Constante physique dont on ne connaît pas la valeur : milieu traversé par une onde...

Apport du Stochastique

- Prise en compte du caractère aléatoire de certaines composantes de X
 - Mesures physiques entachées d'erreurs : Pression, température...
 - Constante physique dont on ne connaît pas la valeur : milieu traversé par une onde...
 - Permet de modéliser en même temps plusieurs modes pour le paramètre : distribution bimodale...



Apport du Stochastique

- Prise en compte du caractère aléatoire de certaines composantes de X
 - Mesures physiques entachées d'erreurs : Pression, température...
 - Constante physique dont on ne connaît pas la valeur : milieu traversé par une onde...
 - Permet de modéliser en même temps plusieurs modes pour le paramètre : distribution bimodale...

- **Méthodes d'estimation paramétrique, non paramétrique**

Techniques présentées

Techniques présentées

- **Analyse de sensibilité à la Sobol**

Techniques présentées

- Analyse de sensibilité à la Sobol
 - Parmi les composantes (aléatoires) de l'entrée (vectorielle) X quelles sont celles ayant le plus d'influence sur la sortie?
 - "l'influence" est quantifiée en terme de "quantité de variabilité" induite par cette composante.
 - Analyse globale prenant en compte toute la distribution de l'entrée.
- Méthodes de surface réponse (Modèle réduit)

Techniques présentées

- Analyse de sensibilité à la Sobol
 - Parmi les composantes (aléatoires) de l'entrée (vectorielle) X quelles sont celles ayant le plus d'influence sur la sortie?
 - "l'influence" est quantifiée en terme de "quantité de variabilité" induite par cette composante.
 - Analyse globale prenant en compte toute la distribution de l'entrée.
- Méthodes de surface réponse (Modèle réduit)
 - Remplacer le code compliqué par un code numérique plus simple bâti à partir de quelques essais et économique en temps de calcul.
 - Objectif : optimisation, calcul de seuil critique, analyse de sensibilité...
 - Méthode présentée aujourd'hui : issue du paradigme (artificiel) de la géostatistique le KRIEGEAGE.

Page de Pub I

Page de Pub I

- **Recherche/Développement**

Page de Pub I

- Recherche/Développement
 - GDR CNRS MASCOT NUM
<http://www.gdr-mascotnum.fr/> ,
 - OPUS- Projet ANR de développement d'une plateforme *open source* très large incluant des outils pour l'analyse des codes.
- **Logiciels**

Page de Pub I

- Recherche/Développement
 - GDR CNRS MASCOT NUM
<http://www.gdr-mascotnum.fr/> ,
 - OPUS- Projet ANR de développement d'une plateforme *open source* très large incluant des outils pour l'analyse des codes.
- Logiciels
 - Bibliothèque R développé par B. Iooss et al.
 - Bibliothèque Matlab DACE pour le krigeage
<http://www2.imm.dtu.dk/~hbn/dace/>
 - GEM Logiciel libre développé par O' Oakley O' Hagan pour le calcul numérique des indices de Sobol
<http://www.tonyohagan.co.uk/academic/GEM/index.html>

Page de Pub II

Page de Pub II

- **Références spéciales copinage pour démarrer**

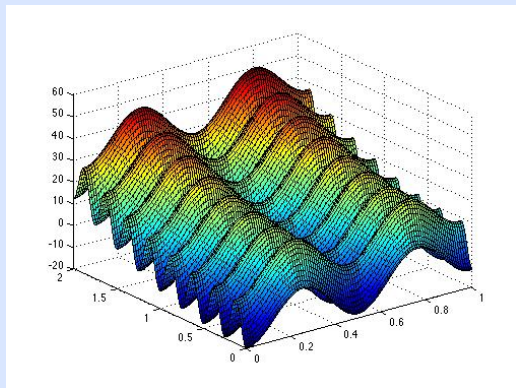
Page de Pub II

- Références spéciales copinage pour démarrer
 - Régression linéaire et non linéaire : Azais, Antoniadis et al
 - Computer code experiments : Santner et al
 - Analyse de sensibilité : Tarantolla et al, articles pionniers de Sobol, Antoniadis
 - Krigeage : Stein, Cressie

Un modèle jouet pour s'amuser

Fonction de Rastrigin

$$f(x) = f(x_1, x_2) = 8\|x\|^2 - 10(\cos(4\pi x_1) + \cos(8\pi x_2))$$



Voir <http://www.gdr-mascotnum.fr/doku.php?id=benchmarks>

Rappel de l'objectif

Modèle

$$Y = f(X).$$



- $X = (X_i)_{i=1\dots k}$ est le vecteur des entrées
- Y est la sortie du code (nombre réel).

Objectif : Quelles composantes de X sont les plus influentes sur la sortie Y ?

Méthodes déterministes

Grosso Modo elles sont basées sur la dérivation de f :

Méthodes déterministes

Grosso Modo elles sont basées sur la dérivation de f :

- \bar{x} un point de fonctionnement

Méthodes déterministes

Grosso Modo elles sont basées sur la dérivation de f :

- \bar{x} un point de fonctionnement
- l'influence de X_j est mesurée par $(\frac{\partial f}{\partial X_j})(\bar{x})$.

Calcul effectif des dérivées

Méthodes déterministes

Grosso Modo elles sont basées sur la dérivation de f :

- \bar{x} un point de fonctionnement
- l'influence de X_j est mesurée par $(\frac{\partial f}{\partial X_j})(\bar{x})$.

Calcul effectif des dérivées

- Différences finies

$$\left(\frac{\partial f}{\partial X_j}\right)(\bar{x}) \approx h^{-1} [f(\bar{x}_{j,h+}) - f(\bar{x}_{j,h-})]$$

Méthodes déterministes

Grosso Modo elles sont basées sur la dérivation de f :

- \bar{x} un point de fonctionnement
- l'influence de X_j est mesurée par $(\frac{\partial f}{\partial X_j})(\bar{x})$.

Calcul effectif des dérivées

- Différences finies

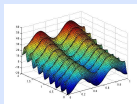
$$\left(\frac{\partial f}{\partial X_j}\right)(\bar{x}) \approx h^{-1} [f(\bar{x}_{j,h+}) - f(\bar{x}_{j,h-})]$$

- Méthode de dérivation adjointe : la dérivée de f est calculée par le code (modèles d'EDP).

Méthodes déterministes-Exemple modèle jouet

Fonction de Rastrigin

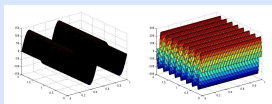
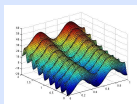
$$f(x) = f(x_1, x_2) = 8\|x\|^2 - 10(\cos(4\pi x_1) + \cos(8\pi x_2))$$



Méthodes déterministes-Exemple modèle jouet

Fonction de Rastrigin

$$f(x) = f(x_1, x_2) = 8\|x\|^2 - 10(\cos(4\pi x_1) + \cos(8\pi x_2))$$



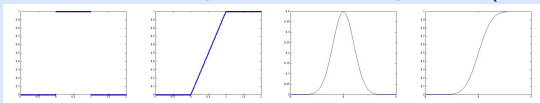
Méthode des dérivées très instable.

Quelques notions de probabilités

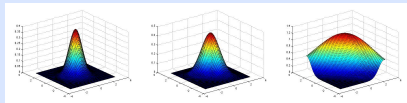
- Distributions de probabilités

- Z Variable aléatoire sur \mathbb{R} : bien souvent variable à *densité*. La répartition de Z est décrite par une fonction positive ("la

masse").



- Vecteur aléatoire sur \mathbb{R}^2
- Généralisation : vecteur aléatoire sur \mathbb{R}^k . Exemple loi gaussienne multivariée centrée de densité



$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} \sqrt{\det \Gamma}} \exp\left[-\frac{1}{2} z^T \Gamma^{-1} z\right].$$

- Indépendance de variable aléatoires (Z_1, Z_2) : observer Z_1 ne donne aucune information sur la loi de Z_2 .

Quelques notions de probabilités : Espérance, Variance

Z une variable aléatoire de distribution F .

- Espérance d'une variable aléatoire : $\mathbb{E}(Z)$
 - Centre de gravité
 - Constante qui explique au mieux la variable aléatoire
 - Projection de la variable aléatoire sur les variables *aléatoires* constantes.
- Variance d'une variable aléatoire : $\text{Var}(Z)$
 - Moment d'inertie
 - Magnitude des fluctuations autour de la moyenne
 - Norme carré de la variable une fois ôtée la composante constante

Théorème de Pythagore

$$\mathbb{E}(Z^2) = \|Z\|^2 = \|\mathbb{E}(Z)\|^2 + \|Z - \mathbb{E}(Z)\|^2 = \mathbb{E}(Z)^2 + \text{Var}(Z)$$

$$\text{Var}(Z) = \mathbb{E}(Z^2) - \mathbb{E}(Z)^2.$$

Exemples de distributions : Espérance, Variance

- La plus plébicitée : Loi Normale (m, σ^2)
 - densité sur \mathbb{R}

$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(z - m)^2}{2\sigma^2} \right].$$

- Espérance

$$\mathbb{E}(Z) = \int_{-\infty}^{+\infty} zg(z)dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(z - m)^2}{2\sigma^2} \right] dz = m.$$

- Variance

$$\text{Var}(Z) = \mathbb{E}[(Z - \mathbb{E}(Z))^2] = \mathbb{E}(Z^2) - [\mathbb{E}(Z)]^2 = \sigma^2.$$

- La plus ignorante : Loi Uniforme sur $[z_{\min}, z_{\max}]$
 - densité sur \mathbb{R}

$$g(z) = \frac{\mathbf{1}_{[z_{\min}, z_{\max}]}(z)}{z_{\max} - z_{\min}}.$$

- Espérance

$$\mathbb{E}(Z) = \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} zg(z)dx = \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} zdz = \frac{z_{\min} + z_{\max}}{2}$$

- Variance

$$\text{Var}(Z) = \mathbb{E}[(Z - \mathbb{E}(Z))^2] = \mathbb{E}(Z^2) - [\mathbb{E}(Z)]^2 = \frac{(z_{\max} - z_{\min})^2}{12}.$$

Quelques notions de probabilités : Espérance conditionnelle

(Z_1, Z_2) un vecteur aléatoire.

- Espérance Conditionnelle de Z_2 sachant X : $\mathbb{E}(Z_2|Z_1)$
 - On a observé $Z_1 = z_1$ comment prédire au mieux Z_2 ?
 - Quelle est la meilleure fonction de Z_1 qui explique Z_2 ?
 - Projection de Z_2 sur les fonctions de Z_1 .

Exemples

- $\mathbb{E}(Z_2|Z_1) = \mathbb{E}(Z_2)$ si (Z_1, Z_2) sont des variables indépendantes.
- $\mathbb{E}(Z_2|Z_1) = \rho Z_1$ pour des gaussiennes centrées (vecteur gaussien)

- Quelques petits trucs intéressants pour $\mathbb{E}(Z_2|Z_1)$
 - $\mathbb{E}[\mathbb{E}(Z_2|Z_1)] = \mathbb{E}[Z_2]$
 - $\mathbb{E}[\psi(Z_1)Z_2|Z_1] = \psi(Z_1)\mathbb{E}(Z_2|Z_1)$
 - Théorème de Pythagore

$$\mathbb{E}[Z_2^2] = \mathbb{E}[\mathbb{E}(Z_2|Z_1)^2] + \mathbb{E}[(Z_2 - \mathbb{E}(Z_2|Z_1))^2]$$

En ôtant $[\mathbb{E}(Z_2)]^2$

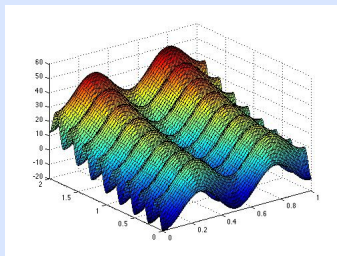
$$\text{Var}(Z_2) = \text{Var}[\mathbb{E}(Z_2|Z_1)] + \mathbb{E}[(Z_2 - \mathbb{E}(Z_2|Z_1))^2].$$

On peut bien sûr généraliser la notion d'espérance conditionnelle pour un conditionnement vectoriel (Z_1 vecteur aléatoire).

Exemple modèle jouet

- Fonction de Rastrigin

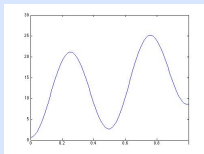
$$Y = f(X) = f(X_1, X_2) = 8\|X\|^2 - 10(\cos(4\pi X_1) + \cos(8\pi X_2))$$



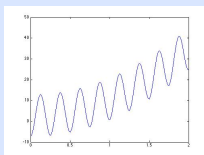
Exemple modèle jouet

Supposons $X_1 \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et $X_2 \sim \mathcal{U}([0, 2])$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = 8X_1^2 - 10 \cos(4\pi X_1) + \frac{32}{3}$$



$$\mathbb{E}(Y|X_2) = 8X_2^2 - 10 \cos(8\pi X_2) + \frac{8}{3}$$



Exemple de conditionnement vectoriel (très important!!)

Modèle gaussien centré

$$Z^T = (Z_1, Z_2)^T = (Z_1^1, \dots, Z_1^l, Z_2)$$

vecteur gaussien de densité

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} \sqrt{\det \Gamma}} \exp\left[\frac{1}{2} z^T \Gamma^{-1} z\right].$$

Γ est la matrice de covariance du vecteur aléatoire Z :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_{Z_1} & c_{Z_1, Z_2}^T \\ c_{Z_1, Z_2} & \sigma_{Z_2}^2 \end{pmatrix}$$

- Γ_{Z_1} est la matrice de covariance de Z_1 ,
- c_{Z_1, Z_2} est la covariance de Z_1 et Z_2 (vecteur ligne),
- $\sigma_{Z_2}^2$ est la variance de Z_2 .

Modèle gaussien centré

Théorème

$$\mathbb{E}(Z_2|Z_1) = c_{Z_1, Z_2} \Gamma_{Z_1}^{-1} Z_1,$$

$$\mathbb{E}[Z_2 - \mathbb{E}(Z_2|Z_1)]^2 = \sigma_{Z_2}^2 - c_{Z_1, Z_2} \Gamma_{Z_1}^{-1} c_{Z_1, Z_2}^T.$$

- Prédicteur linéaire,
- exemple unidimensionnelle : $\mathbb{E}(Z_2|Z_1) = \rho Z_1$,
- Filtre de Kalman=écriture récursive de ce résultat.

Méthode de Sobol

Modèle

$$Y = f(X).$$

On va mesurer l'influence *stochastique* de chacune des entrées en utilisant les projections que l'on vient de voir:

Définition

Indice de Sobol pour la sortie Y

- 1er ordre pour l'entrée X_i

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

- 2nd ordre pour les entrées X_i, X_j

$$S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_i, X_j])}{\text{Var}(Y)} - S_i - S_j$$

Décomposition de Sobol-Antoniadis (Hoefding)

Généralisation: 3ème ordre pour les entrées X_i, X_j, X_l

$$S_{i,j,l} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_i, X_j, X_l])}{\text{Var}(Y)} - \sum_{i_1 < i_2 \in \{i,j,l\}} S_{i_1, i_2} + S_i + S_j + S_l$$

$S_{i,j,l}$ Influence conjointe des entrées X_i, X_j et X_k (effet deux à deux gommés).

Théorème (Sobol-Antoniadis-Hoefding)

On suppose les v.as. X_1, X_2, \dots, X_k indépendantes. Alors

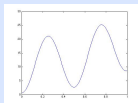
$$1 = \sum S_{ijl\dots}$$

Estimation des Indices de Sobol

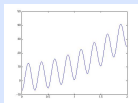
- Méthodes de Monte Carlo,
- Méthodes de Quasi Monte Carlo: Fast,
- Méthodes de Surface de réponse: Krigeage O Oakley et al, looss et al,
- Méthodes de statistique mathématiques: Da Veiga, Wahl, G

Exemple du modèle jouet

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = 8X_1^2 - 10 \cos(4\pi X_1) + \frac{32}{3}$$



$$\mathbb{E}(Y|X_2) = 8X_2^2 - 10 \cos(8\pi X_2) + \frac{8}{3}$$



Rappel de l'objectif

Modèle

$$Y = f(X).$$



- $X = (X_i)_{i=1\dots k}$ est le vecteur des entrées
- Y est la sortie du code (nombre réel).

Objectif : Construire une fonction \tilde{f} pas trop cher à calculer pour émuler (approximer, estimer) f .

Quelques notions des champs gaussiens

Vecteurs gaussiens $Z = (Z_i)_{i=1\dots k}$: un nombre fini de composantes

Champs aléatoire gaussien $Z = (Z_t)_{t \in T}$: *autant* de composantes que d'éléments de T ($T = \mathbb{Z}, \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{R}^k$).

Vecteurs gaussiens : la densité de probabilité est

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} \sqrt{\det \Gamma}} \exp\left[\frac{1}{2}(z - m)^T \Gamma^{-1}(z - m)\right].$$

Les paramètres importants sont :

- La moyenne m vecteur de \mathbb{R}^k ,
- La matrice de variance covariance Γ ($\gamma_{i,j} = \text{cov}(Z_i, Z_j)$)

Champs aléatoires gaussiens

Champs aléatoire gaussien : quel que soit le nombre de points échantillonnés t_1, t_2, \dots, t_p , le vecteur

$$Z := (Z_{t_i})_{i=1\dots p}$$

est un vecteur gaussien Les paramètres importants sont :

- La fonction moyenne $m(t) = \mathbb{E}(Z_t)$, $t \in T$,
- La fonction de covariance $\gamma(t, t') = \text{cov}(Z_t, Z_{t'})$

Champs aléatoires gaussiens STATIONNAIRES

Champs aléatoire gaussien STATIONNAIRE : modélisation d'un phénomène *invariable* dans le temps ou l'espace Traduction sur les paramètres :

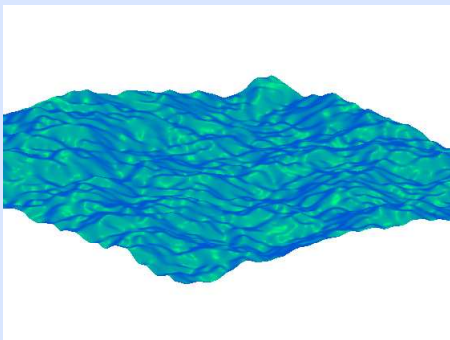
- La fonction moyenne est constante $m(t) = m, t \in T$,
- La fonction de covariance ne dépend que de $t - t'$
 $\gamma(t, t') = \text{cov}(Z_t, Z_{t'}) = r(t - t')$.

Cadre classique

- La fonction moyenne est nulle $m(t) = 0, t \in T$,
- La fonction de covariance $r(u)$ dépend d'un paramètre θ . Par exemple si isotropie $r(u) = \exp(-h\|u\|^\alpha)$ $u \in T$. Ici paramètre $\theta = (h, \alpha)$ ($h > 0, \alpha \geq 2$).

Exemple modélisation de la mer

Champs aléatoire gaussien STATIONNAIRE sur \mathbb{R}^2 avec une fonction de covariance *ad hoc* (Pub: voir le livre de Azais-Wchebor)



Le Krigeage 0

Modèle bayésien de modélisation en géostatistique

Le Krigeage 0

Modèle bayésien de modélisation en géostatistique

$$f(x) = \alpha_\theta(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

Le Krigeage 0

Modèle bayésien de modélisation en géostatistique

$$f(x) = \alpha_{\theta}(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- θ et ν paramètres vectoriels inconnus

Le Krigeage 0

Modèle bayésien de modélisation en géostatistique

$$f(x) = \alpha_{\theta}(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- θ et ν paramètres vectoriels inconnus
- α_{θ} une fonction moyenne (*trend*) simple : $\langle \theta, x \rangle$

Le Krigeage 0

Modèle bayésien de modélisation en géostatistique

$$f(x) = \alpha_{\theta}(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- θ et ν paramètres vectoriels inconnus
- α_{θ} une fonction moyenne (*trend*) simple : $\langle \theta, x \rangle$
- $(Z_x)_{x \in T}$ champs gaussien stationnaire centré de covariance $r_{\nu}(x)$, $x \in T$

Le Krigeage I

Idée principale=LE CODE EST LA RÉALISATION D'UNE
TRAJECTOIRE D'UN CHAMPS GAUSSIEN

Le Krigeage I

Idée principale=LE CODE EST LA RÉALISATION D'UNE
TRAJECTOIRE D'UN CHAMPS GAUSSIEN

Modèle joué au *hasard*

$$Y(x) = f(x)(x \text{ déterministe} \in T)$$

Le Krigeage I

Idée principale=LE CODE EST LA RÉALISATION D'UNE
TRAJECTOIRE D'UN CHAMPS GAUSSIEN

Modèle joué au *hasard*

$$Y(x) = f(x)(x \text{ déterministe} \in T)$$



Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

On a fait tourner le code sur les configurations x_1, \dots, x_N on mesure donc $f(x_1), \dots, f(x_N)$.

Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

On a fait tourner le code sur les configurations x_1, \dots, x_N on mesure donc $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Modèle

$$Y(x) = \alpha_\theta(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

On a fait tourner le code sur les configurations x_1, \dots, x_N on mesure donc $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Modèle

$$Y(x) = \alpha_\theta(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- On utilise $f(x_1), \dots, f(x_N)$ pour estimer les paramètres θ et ν

Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

On a fait tourner le code sur les configurations x_1, \dots, x_N on mesure donc $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Modèle

$$Y(x) = \alpha_\theta(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- On utilise $f(x_1), \dots, f(x_N)$ pour estimer les paramètres θ et ν
- Méthode du maximum de vraisemblance

Le Krigeage II

Modèle bayésien pour modéliser la boîte noire

On a fait tourner le code sur les configurations x_1, \dots, x_N on mesure donc $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Modèle

$$Y(x) = \alpha_\theta(x) + Z_x(\nu)(x \in T)$$

- On utilise $f(x_1), \dots, f(x_N)$ pour estimer les paramètres θ et ν
- Méthode du maximum de vraisemblance
- *A la louche* : ajustement moindres carrés des paramètres avec fonction de poids fonction des paramètres

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.
- Paramètres θ et ν *identifiés*

Émulateur gaussien

$$\hat{f}(x) = \hat{Y}(x) = \mathbb{E}[Y(x) | Y(x_1), \dots, Y(x_N)]$$

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.
- Paramètres θ et ν *identifiés*

Émulateur gaussien

$$\hat{f}(x) = \hat{Y}(x) = \mathbb{E}[Y(x) | Y(x_1), \dots, Y(x_N)]$$

- Formule très simple

$$\hat{Y}(x) = \alpha_\theta(x) + \mathbb{E}[Z_x | Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N}]$$

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.
- Paramètres θ et ν *identifiés*

Émulateur gaussien

$$\hat{f}(x) = \hat{Y}(x) = \mathbb{E}[Y(x) | Y(x_1), \dots, Y(x_N)]$$

- Formule très simple

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x) &= \alpha_\theta(x) + \mathbb{E}[Z_x | Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N}] \\ &= \alpha_\theta(x) + c_x^T \Gamma_N^{-1} Z^N \end{aligned}$$

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.
- Paramètres θ et ν *identifiés*

Émulateur gaussien

$$\hat{f}(x) = \hat{Y}(x) = \mathbb{E}[Y(x) | Y(x_1), \dots, Y(x_N)]$$

- Formule très simple

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x) &= \alpha_\theta(x) + \mathbb{E}[Z_x | Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N}] \\ &= \alpha_\theta(x) + c_x^T \Gamma_N^{-1} Z^N \end{aligned}$$

- c_x vecteur des covariances entre Z_x et Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N} ,

Le Krigeage III

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- On dispose de $f(x_1), \dots, f(x_N)$. Valeurs modélisés par $Y(x_1), \dots, Y(x_N)$.
- Paramètres θ et ν *identifiés*

Émulateur gaussien

$$\hat{f}(x) = \hat{Y}(x) = \mathbb{E}[Y(x) | Y(x_1), \dots, Y(x_N)]$$

- Formule très simple

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x) &= \alpha_\theta(x) + \mathbb{E}[Z_x | Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N}] \\ &= \alpha_\theta(x) + c_x^T \Gamma_N^{-1} Z^N \end{aligned}$$

- c_x vecteur des covariances entre Z_x et Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N} ,
- Γ_N matrice de covariance de $Z^N := (Z_{x_1}, \dots, Z_{x_N})^T$.

Le Krigeage IV

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

Le Krigeage IV

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- Méthode d'émulation par régression linéaire

Le Krigeage IV

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- Méthode d'émulation par régression linéaire

$$\hat{Y}(x) = \alpha_{\theta}(x) + c_x^T \Gamma_N^{-1} Z^N$$

Le Krigeage IV

Bayésien jusqu'au bout des ongles...

- Méthode d'émulation par régression linéaire

$$\hat{Y}(x) = \alpha_{\theta}(x) + c_x^T \Gamma_N^{-1} Z^N$$

- Erreur de prévision du modèle gaussien (si paramètres supposés connus!!!)

$$\mathbb{E}[(Y(x) - \hat{Y}(x))^2] = r_{\nu}(0) - c_x^T \Gamma_N^{-1} c_x$$

Un exemple

d'après :<http://www2.imm.dtu.dk/~hbn/dace/>

Un exemple

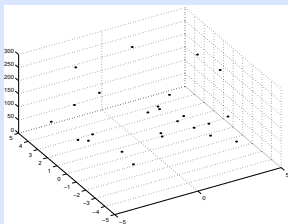
d'après : <http://www2.imm.dtu.dk/hbn/dace/>



Introduction

Given $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$. May be a black-box (and “expensive”) function.

Know values $y_i = f(s_i)$ at *design sites*
 $S = \{s_1, \dots, s_m\}$. How does the function
behave in between?



Un exemple

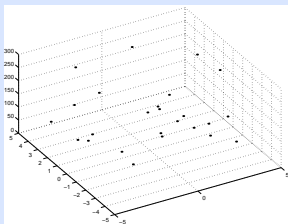
d'après : <http://www2.imm.dtu.dk/hbn/dace/>



Introduction

Given $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$. May be a black-box (and “expensive”) function.

Know values $y_i = f(s_i)$ at *design sites*
 $S = \{s_1, \dots, s_m\}$. How does the function
 behave in between?

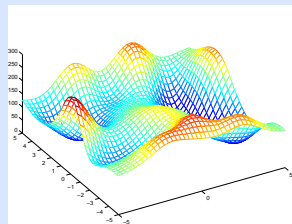


ISMP 2003

3



GAUSS model



ISMP 2003

4

End

Gracias por su atencion
Thanks for your attention
Merci
Obrigado
Danke
Grazie