

## Chapitre 2

# Méthodes d'analyse de sensibilité

En analyse de sensibilité, on veut identifier la sensibilité de la sortie d'un modèle par rapport aux variables d'entrée ou facteurs du modèle. On considère un modèle à  $n$  variables et une sortie :

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Dans la section 2.1, on présente des méthodes locales, la section 2.2 porte sur des méthodes de criblage. Les sections 2.3, 2.4, 2.5 et 2.6 portent sur des méthodes globales et l'analyse en composantes principales.

### 2.1 Méthodes locales

Dans le cas d'une fonction différentiable, la première mesure de sensibilité à laquelle on peut penser est une mesure basée sur les dérivées partielles. On peut définir un coefficient  $S_i$  pour chaque facteur d'entrée  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,

$$S_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x^0) \quad (2.1)$$

où  $x^0 = (x_1^0, \dots, x_n^0)$  est un point de dimension  $n$ , appelé point nominal. Toutefois, cette mesure semble ne pas être toujours appropriée. Considérons l'exemple d'une facture pour  $n$  objets. On note  $x_i > 0$  le prix du  $i^e$  objet,  $i = 1, \dots, n$ , et  $y = f(x) = \sum_{i=1}^n x_i$ . La mesure de sensibilité décrite dans (2.1) donnerait  $S_i = 1$  pour chaque objet, indépendamment du prix de chacun de ces objets. On peut donc chercher à normaliser la mesure (2.1) en fonction de la valeur du facteur et la valeur de la sortie :

$$S_i = \frac{x_i^0}{f(x^0)} \frac{\partial y}{\partial x_i}(x^0). \quad (2.2)$$

De cette manière, le coefficient de sensibilité de l'objet le plus cher sera plus grand que ceux des autres objets.

Une méthode simple pour le calcul numérique d'une approximation des dérivées partielles est un calcul par différences finies. On fait varier légèrement un paramètre à la fois, et on compare la variation de la sortie du modèle. Ces variations sont appelées effets élémentaires et sont notées  $E_i^0$  s'ils sont calculés au point  $x^0$ . Par exemple, pour une fonction différentiable,

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x^0) \approx E_i^0 = \frac{f(x^0 + \Delta e_i) - f(x^0)}{\Delta}, \quad (2.3)$$

où  $e_i$  est un vecteur ne contenant que des 0 et un 1 à la  $i^e$  composante et  $\Delta \in \mathbb{R}$ . Une petite valeur pour le paramètre  $\Delta$  donne, en général, une bonne approximation, toutefois trouver la valeur idéale reste compliqué. On note qu'il existe d'autres approximations par différences finies qui peuvent utiliser plus de points.

Les mesures basées sur les dérivées premières calculées par différences finies dépendent donc grandement du paramètre  $\Delta$  et du point nominal  $x^0$ . Rien ne peut garantir la qualité de la mesure lorsqu'on s'éloigne de ce point. De plus, cette mesure néglige une possible interaction entre les différents

facteurs en entrée. Bien entendu, on peut imaginer des mesures qui se basent sur des approximations des dérivées d'ordre supérieures pour tenir compte de telles interactions. On note également que l'idée centrale de ces mesures est d'approximer les dérivées partielles de la fonction. Dans le cas où celle-ci n'est pas différentiable, on peut toujours calculer les différences finies de l'équation (2.3) mais cela ne donne aucune garantie de la qualité d'une telle mesure.

Cette méthode requière de pouvoir choisir les points d'évaluations afin de calculer des mesures de sensibilité. Ceci n'est pas applicable dans notre situation car on ne dispose que des évaluations faites à partir de MADS.

## 2.2 Méthodes de criblage

La question centrale de l'analyse de sensibilité est, parmi tous les facteurs d'entrée, lesquels sont *réellement importants*. On suppose que le nombre de facteurs plus importants que les autres est relativement petit, sinon ils ne seraient pas *réellement importants*.

Les méthodes de criblage sont en général utilisées pour analyser de grands modèles, avec plusieurs centaines de facteurs d'entrée par exemple. Elles sont considérées comme des méthodes à faible coût mais donnent une analyse qualitative, *i.e.* elles peuvent classer les entrées par ordre d'importance ou du moins identifier les variables qui ont un effet négligeables par rapport aux autres, mais ne peuvent quantifier la différence d'influence entre deux facteurs. Une utilisation des méthodes de criblage est d'exploiter un petit nombre d'évaluations pour identifier des variables peu influentes sur le modèle, pour ensuite simplifier le modèle et appliquer d'autres méthodes d'analyse de sensibilité, souvent plus précise mais plus coûteuse. L'idée derrière les méthodes de criblage est de discrétiser les valeurs possibles de chaque variable en plusieurs niveaux, et de faire varier les entrées en fonction de ces niveaux.

Parmi les types de méthodes de criblage, les *designs One At a Time* (OAT) sont les plus utilisés. Ils étudient l'importance d'une entrée en faisant varier un facteur à la fois. Bien que cela semble une analyse locale, les auteurs de [46] présentent une adaptation globale des méthodes de criblage. Chaque variable peut prendre deux ou trois valeurs possibles, en générale une valeur nominale et deux extrêmes. Ensuite, on applique une étude statistique d'un échantillon d'effets élémentaires de chaque variable. On peut noter qu'il existe d'autres méthodes de type OAT moins coûteuse que la méthode de Morris décrite dans [46] mais cette dernière reste considérée comme plus complète [35]. Si on ne peut effectuer qu'un petit nombre d'évaluations, plus faible que le nombre de facteurs d'entrée par exemple, on peut se référer aux méthodes présentées dans [14, 26, 41].

La méthode de Morris [46] cherche à classer les variables en trois groupes : celles avec un effet négligeable, celles avec un effet linéaire et celles avec un effet non-linéaire et/ou des interactions. On suppose que l'on veut analyser un modèle à  $n$  facteurs d'entrée  $x_1, \dots, x_n$  et une sortie  $y = f(x_1, \dots, x_n)$ , et que chaque facteur peut prendre  $p > 1$  valeurs entre 0 et 1, à savoir  $x_i \in \{0; \frac{1}{p-1}; \frac{2}{p-1}; \dots; \frac{p-2}{p-1}; 1\}$ . A partir d'un point  $x^0$ , un effet élémentaire du facteur  $i$  est défini comme

$$E_i^0 = \frac{f(x^0 + \Delta e_i) - f(x^0)}{\Delta}, \quad (2.4)$$

où  $\Delta \in \{\frac{1}{p-1}, \dots, 1 - \frac{1}{p-1}\}$ . On peut répéter ce calcul d'un effet élémentaire à partir de plusieurs points. La moyenne de ces effets élémentaires à partir de  $r$  points  $\{x^j\}_{j=1}^r$  est notée

$$\mu_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r E E_i^j. \quad (2.5)$$

De même, on peut calculer une moyenne des valeurs absolues  $\mu_i^*$  et l'écart-type  $\sigma_i$  des effets élémentaires

de chaque variable,

$$\mu_i^* = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r |EE_i^j|, \quad (2.6)$$

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{r-1} \sum_{j=1}^r (EE_i^j - \mu_i)^2. \quad (2.7)$$

La moyenne  $\mu_i^*$  donne une mesure de sensibilité du modèle. Si  $\mu_i^*$  est petit, la variable  $i$  a un effet peu important. L'écart-type  $\sigma_i$  donne une idée de l'importance des interactions entre les variables. En effet, si  $\sigma_i$  est grand, cela indique que les effets élémentaires du facteur  $i$  dépendent du point nominal auquel ils sont calculés, et donc des valeurs des autres variables. A l'opposé, si  $\sigma_i$  est faible, cela indique que l'effet d'une variable ne dépend pas de la valeur des autres entrées, et donc que la variable  $i$  a une effet linéaire.

Ces effets élémentaires peuvent avoir un impact opposé en fonction du point nominal et cela peut résulter en un faible  $\mu_i$ . Dans ce cas,  $\mu_i^*$  sera grand. A partir de  $\mu_i, \mu_i^*, \sigma_i^*$ , on peut donc déduire de l'importance relative de chaque variable  $i = 1, \dots, n$ , et donc les classer en trois groupes. Cela peut se faire en représentant les variables dans un graphe  $\sigma$  et fonction de  $\mu^*$ .

Par exemple, on considère la fonction suivante :

$$f : [-1; 1]^7 \mapsto \mathbb{R}, x \rightarrow 110x_1 + 100x_2 + 10x_3 + 60x_3x_4 + 50x_5^2 + 5x_6 + 2x_7 \quad (2.8)$$

En appliquant la méthode de Morris en considérant  $r = 5$  répétitions, ce qui donne  $r(n+1) = 40$  évaluations du modèle, nous obtenons la figure 2.1. Nous remarquons que l'on peut distinguer facilement trois groupes de variables. Les premières sont les deux variables proche de l'origine. Il s'agit des variables qui ont un impact négligeable sur la fonction, les variables  $x_6$  et  $x_7$ . En effet, aussi bien la moyenne que l'écart-type de leurs effets élémentaires sont très faibles. Le deuxième groupe reprend les variables en bas à droite, c'est-à-dire  $x_1$  et  $x_2$  qui ont un effet uniquement linéaire, tout comme  $x_6$  et  $x_7$ , mais non négligeable ; on peut le remarquer car l'écart-type de leurs effets élémentaires est nul. Le troisième groupe reprend les variables qui un  $\mu^*$  et un  $\sigma$  relativement importants. Il s'agit donc de variables ayant un effet non-négligeable et non-linéaire sur le modèle. On peut trouver les variables  $x_3, x_4$  et  $x_5$  dans ce groupe.

Grâce à ce genre de méthodes, on peut explorer l'entièreté du domaine et avoir une idée de l'impact global des variables sur le modèle. Toutefois, les résultats d'une telle analyse dépendent du choix des points nominaux auxquels on calcule les effets élémentaires.

Cette méthode n'est pas directement applicable dans notre situation, et ce pour la même raison que précédemment. On veut exploiter l'ensemble des évaluations reprises dans la cache et on ne peut choisir des points spécifiques pour calculer une mesure de sensibilité. Par contre, une telle méthode permet, en un faible nombre d'évaluations, d'avoir une idée des variables non-influentes.

Contrairement aux méthodes locales, les méthodes globales ont pour but de donner des mesures de sensibilité qui seraient valides dans tout le domaine des variables d'entrée et indépendantes d'un choix arbitraire de points nominaux. On considère dans ce document des méthodes basées sur la décomposition de la variance et une méthode basée sur des modèles linéaires. On note qu'il existe également des méthodes basées sur d'autres types de modèle.

## 2.3 Méthodes basées sur la variance

Plusieurs méthodes d'analyse de sensibilité sont basées sur la variance. L'intérêt de cette mesure est son indépendance par rapport au modèle. Elle permet également de mettre en évidence les effets de la variation d'un facteur, ainsi que les effets dûs aux interactions entre les variables.

L'idée derrière l'analyse de sensibilité basée sur la variance est de considérer les variables d'entrée  $x_i$  et de la sortie  $y = f(x)$  comme des variables aléatoires, que l'on notera  $X_i$  et  $Y$ . La sensibilité de la sortie à une variable correspond à la réduction de variance observée si on fixe cette variable d'entrée.

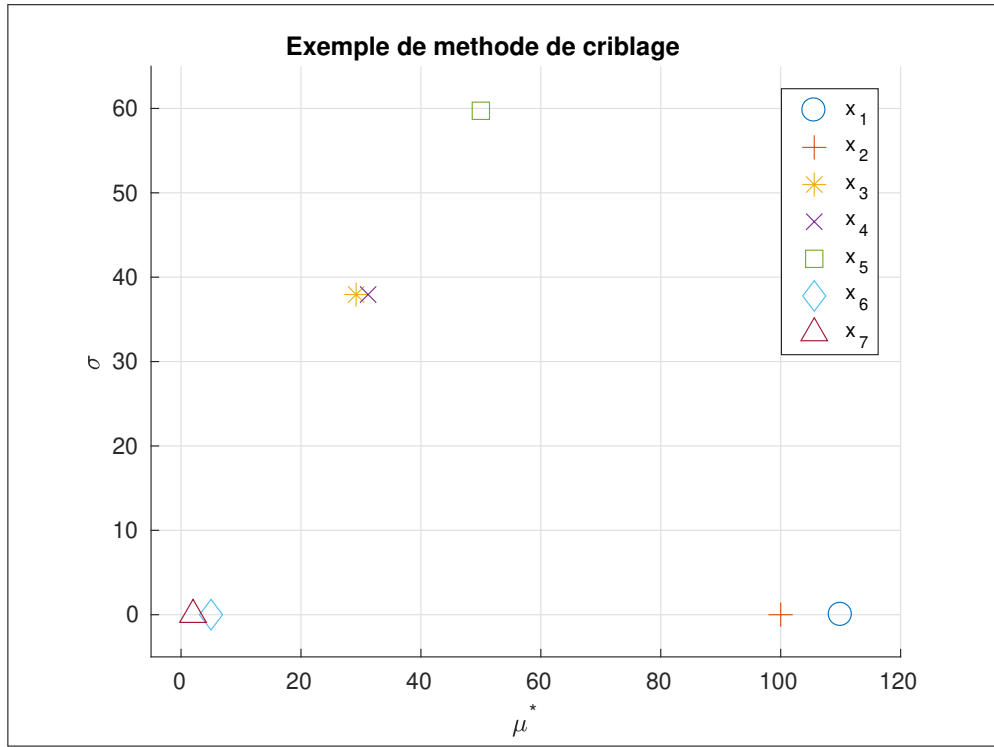


FIGURE 2.1 – Exemple d’application de la méthode de Morris sur la fonction (2.8)

On peut décomposer la variance de la sortie de la manière suivante :

$$Var[Y] = Var_{X_i}[E(Y|X_i)] + E_{X_i}(Var[Y|X_i]), \quad (2.9)$$

$$1 = \frac{Var_{X_i}[E(Y|X_i)]}{Var[Y]} + \frac{E_{X_i}(Var[Y|X_i])}{Var[Y]}, \quad (2.10)$$

où  $Var_{X_i}[E(Y|X_i)]$  est la variance de l’espérance de  $Y$  conditionnelle à  $X_i$  et  $E_{X_i}(Var[Y|X_i])$  est l’espérance de la variance de  $Y$  conditionnelle à  $X_i$ . L’équation (2.9) est obtenue en divisant l’équation (2.10) par  $Var[Y]$ .

Le premier terme de (2.10) est considéré comme une bonne mesure de sensibilité puisqu’il représente la proportion de variance de  $Y$  qui vient de  $X_i$ . Il s’agit d’une variance de l’espérance de conditionnelle (VCE) et on la note

$$VCE[X_i] = Var_{X_i}[E(Y|X_i)]. \quad (2.11)$$

Les différentes méthodes présentées ensuite montrent différents moyens d’estimer la VCE de chaque facteur. On présente ici la mesure du rapport de corrélation, les indices de Sobol’ et la méthode FAST.

### 2.3.1 Rapport de corrélation

Le rapport de corrélation  $\eta_i$  du facteur  $i$ ,  $1 = \dots, n$  est défini comme

$$\eta_i^2 = \frac{Var_{X_i}[E(Y|X_i)]}{Var[Y]}. \quad (2.12)$$

On cherche un estimateur  $\hat{\eta}_i$  du rapport de corrélation. Pour ce faire, on calcule un estimateur de la variance de  $Y$ ,  $\widehat{Var}[Y]$ , et de la variance de l’espérance conditionnelle  $\widehat{VCE}[X_i]$  et on pose

$$\hat{\eta}_i^2 = \frac{\widehat{VCE}[X_i]}{\widehat{Var}[Y]}. \quad (2.13)$$

Les deux estimateurs nécessaires peuvent être calculés à partir de  $r$  réplifications d'un échantillonnage par hypercube latin de  $m$  éléments. On pose

$$\widehat{Var}[Y] = \frac{1}{mr} \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^r (y_{jl} - \bar{y})^2 \quad (2.14)$$

où  $y_{jl}$  correspond à la sortie d'un échantillon et  $\bar{y} = (1/mr) \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^r y_{jl}$  est la moyenne de toutes les sorties. Le deuxième estimateur est

$$\widehat{VCE}[X_i] = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (\bar{y}_j - \bar{y})^2 - \frac{1}{mr^2} \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^r (y_{jl}^{(i)} - \bar{y}_j)^2, \quad (2.15)$$

où  $y_{jl}^{(i)}$  est obtenu en fixant les valeurs prises par la variable  $X_i$  à ses valeurs dans la première réplification, dans chacune des  $r$  réplifications.

Cette méthode peut être utilisée à partir d'un ensemble d'évaluations déjà effectuées.

### 2.3.2 Indices de Sobol'

La méthode des indices de Sobol' [58] se base sur une décomposition de la fonction du modèle. On suppose que l'espace des variables est un hypercube unitaire en dimension  $n$ , *i.e.*

$$f : \Omega^n = [0; 1]^n \rightarrow \mathbb{R}. \quad (2.16)$$

Chaque sous-ensemble de variables peut avoir un effet sur le modèle. On peut décomposer une fonction  $f$  sous une somme de fonctions  $f_{i_1, \dots, i_m}$  représentant l'effet de chaque sous-ensemble de variables,

$$f(x) = f_0 + \sum_i f_i(x_i) + \sum_i \sum_{j>i} f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{12\dots k}(x_1, x_2, \dots, x_k). \quad (2.17)$$

En choisissant chaque fonction carré-intégrable, comme décrit dans [58], cette décomposition existe et est unique.

Dans le cadre de l'analyse de sensibilité, on suppose que nous avons un vecteur aléatoire  $X = (X_1, \dots, X_n)$  composé de variables indépendantes et  $Y = f(X)$  la sortie d'un modèle déterministe  $f(\cdot)$ . Nous pouvons donc appliquer une analyse de variance fonctionnelle. La variance totale  $D$  de la fonction  $f$  est définie comme

$$D = \int_{\Omega^k} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - f_0^2 \quad (2.18)$$

tandis que les variances partielles sont

$$D_{i_1, i_2, \dots, i_s} = \int_0^1 \dots \int_0^1 f_{i_1 i_2 \dots i_s}^2(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_1} dx_{i_2} \dots dx_{i_s}, \quad (2.19)$$

où  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_s$  et  $s = 1, \dots, k$ .

En prenant le carré de (2.17) et en intégrant sur le domaine, on obtient

$$D = \sum_{i=1}^k D_i + \sum_{1 \leq i < j \leq k} D_{ij} + \dots + D_{i_1, \dots, i_s}. \quad (2.20)$$

On note alors que  $D = Var[Y]$ ,  $D_i = Var[E(Y|X_i)]$ ,  $D_{ij} = Var[E(Y|X_i, X_j)] - D_i - D_j$  et ainsi de suite. Les indices de sensibilité sont définis comme

$$S_{i_1, \dots, i_s} = \frac{D_{i_1, \dots, i_s}}{D}. \quad (2.21)$$

$S_i$  est l'indice de sensibilité du premier ordre du facteur  $i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , et mesure l'effet du facteur  $i$  sur la sortie.  $S_{ij}$  est l'indice de sensibilité du deuxième ordre des facteurs  $i$  et  $j$ ,  $i < j$ , et il mesure l'effet de l'interaction des facteur  $i$  et  $j$ . Une propriété intéressante de ces indices est

$$\sum_{i=1}^n S_i + \sum_{1 \leq i < j \leq n} S_{ij} + \dots + S_{1, 2, \dots, n} = 1. \quad (2.22)$$

On note que le nombre d'indices, correspondant au nombre de sous-ensemble de variables, croit exponentiellement avec la dimension du problème. En pratique, on ne calcule pas les indices d'ordre supérieur à deux.

Les auteurs de [33] présentent également des indices de sensibilité totaux  $ST_i$  d'une variable  $i$  comme la somme de tous les indices qui font intervenir la variable en question. Par exemple, l'indice de sensibilité totale de la variable  $x_1$  d'un modèle à trois variables est

$$ST_1 = S_1 + S_{12} + S_{13} + S_{123}.$$

Lorsque le nombre de variables est important, il peut être judicieux de ne calculer que les indices du premier ordre et les indices totaux.

Les indices de sensibilité du premier ordre peuvent être estimés à partir de deux échantillons de Monte Carlo de taille  $N$ . On construit les estimateurs de la façon suivante :

$$\widehat{f}_0 = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N f(\mathbf{x}_m), \quad (2.23)$$

$$\widehat{D} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N (f(\mathbf{x}_m) - \widehat{f}_0)^2, \quad (2.24)$$

$$\widehat{D}_i = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N f(\mathbf{x}_{(\sim i)m}^{(1)}, x_{im}^{(1)}) f(\mathbf{x}_{(\sim i)m}^{(2)}, x_{im}^{(2)}) - \widehat{f}_0^2, \quad (2.25)$$

où les exposants (1) et (2) indiquent l'échantillon,  $\mathbf{x}_m$  est un point dans  $\Omega^n$  et

$$\mathbf{x}_{(\sim i)m} = (x_{1m}, x_{2m}, \dots, x_{(i-1)m}, x_{(i+1)m}, \dots, x_{nm}).$$

Des manières pratique de calculer les indices de Sobol' du premier ordre et les indices totaux grâce à deux échantillons de Monte Carlo sont décrites dans [52, 58] et [54, section 4.6]. Le calcul de ces indices de sensibilité requière toutefois un grand nombre d'évaluations du modèle. [35] décrit un taux de convergence en  $\sqrt{N}$  où  $N$  est la taille de l'échantillon, ce qui revient en général un ordre de  $10^4$  évaluations du modèle.

### 2.3.3 Méthode FAST

Le *Fourier amplitude sensitivity test* (FAST) [24] est une méthode qui permet d'estimer l'espérance et la variance de la sortie d'un modèle, ainsi que la contribution d'un facteur à la variance. Celle-ci se base sur la transformée de Fourier, calculée en certains points et pour certaines fréquences. L'idée est de transformer des intégrales en  $n$ -dimensions en des intégrales en une dimension.

On pose

$$X_i = G_i(\sin \omega_i s), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.26)$$

En choisissant des bonnes valeurs pour les fréquences  $\omega_i$  et des bonnes transformations  $G_i$ , on peut approximer l'espérance de la sortie  $Y$  comme

$$\mathbb{E}[Y] \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) ds,$$

où  $f(s) = f(G_1(\sin \omega_1 s), G_2(\sin \omega_2 s), \dots, G_k(\sin \omega_k s))$ . De même, l'approximation de la variance peut être calculée :

$$\mathbb{V}[Y] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^2(s) ds - [\mathbb{E}(Y)]^2 \quad (2.27)$$

$$\approx \sum_{j=-\infty}^{\infty} (A_j^2 + B_j^2) - (A_0^2 + B_0^2) \quad (2.28)$$

$$\approx 2 \sum_{j=1}^{\infty} (A_j^2 + B_j^2), \quad (2.29)$$

TABLE 2.1 – Proposition de transformations pour l'équation (2.26) [53]

Transformation	$G_i$	Référence
(A)	$x_i = \bar{x}_i e^{\bar{v}_i \sin(\omega_i s)}$	[24]
(B)	$x_i = \bar{x}_i (1 + \bar{v}_i \sin(\omega_i s))$	[38]
(C)	$x_i = \frac{1}{2} \frac{1}{\pi} \arcsin(\sin(\omega_i s))$	[55]
(D)	$x_i = \frac{1}{2} \frac{1}{\pi} \arcsin(\sin(\omega_i s + \phi_i))$	[55]

où  $A_j$  et  $B_j$  sont les coefficients de Fourier

$$A_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \cos(js) ds, \quad B_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \sin(js) ds. \quad (2.30)$$

Le choix des transformations  $G_i$  est crucial. Différentes sources proposent les différentes transformations du tableau 2.1. Une bonne transformation devrait proposer une distribution uniforme pour chaque facteur. On note dans [53] que les transformations (C) et (D) proposent une meilleure distribution que les transformations (A) et (B), et devraient donc être préférées à ces dernières.

Le calcul des indices de sensibilité se fait en calculant les  $A_j$  et  $B_j$  à leur fréquence fondamentale  $\omega_i$  pour  $i = 1, \dots, n$ , ainsi qu'à leurs harmoniques  $p\omega_i$  pour  $p = 1, 2, \dots$ . On peut approximer la contribution du facteur  $i$  à la variance de la sortie comme

$$D_{\omega_i} \approx 2 \sum_{p=1}^{\infty} (A_{p\omega_i}^2 + B_{p\omega_i}^2).$$

On peut remarquer que les amplitudes de Fourier décroissent lorsque  $p$  croit, donc on peut estimer  $D_{\omega_i}$  par

$$\widehat{D}_{\omega_i} = 2 \sum_{p=1}^M (A_{p\omega_i}^2 + B_{p\omega_i}^2),$$

où  $M$  correspond à la plus grande harmonique considérée, en général  $M = 4$  ou  $M = 6$  ([25], [53] section 8.4). A partir de  $\widehat{D}_{\omega_i}$ , on peut calculer des coefficients équivalents aux indices de Sobol' du premier ordre. De plus, [53, section 8.4.3] présente une méthode basée sur FAST permettant de calculer des indices totaux.

On note que cette méthode est moins coûteuse que les méthodes présentées à la section précédente, mais elle reste coûteuse et est parfois biaisée et/ou instable lorsque la dimension du modèle devient trop grande, supérieur à 10 environ, comme précisé dans [59]. Cette méthode sera donc difficilement exploitable dans le cadre ce projet car nous nous intéressons à de l'optimisation de boîtes noires en dimension de l'ordre de quelques centaines voire quelques milliers de variables.

## 2.4 Méthode basée sur un modèle linéaire

En supposant le modèle linéaire, on peut essayer de calculer des coefficients de régression linéaire. On considère que l'on a un échantillon de  $N$  points et on suppose la relation

$$Y_j = \beta_0 + \sum_{i=1}^N \beta_i X_{ij} + \epsilon_j, \quad \text{pour } j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.31)$$

où  $X_{ij}$  représente l'observation  $j$  de la variable  $x_i$ , pour  $i = 1, \dots, n$  et  $Y_j$  correspond à la sortie de l'échantillon  $(X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{kj})$ . Les  $\beta_i$  sont des coefficients de régression et  $\epsilon_j$  des termes d'erreur. Les coefficients sont à calculer par une méthode de moindres carrés.

En supposant que les variables sont indépendantes entre elles, et qu'elles le sont également des erreurs, on peut décomposer la variance du modèle (2.31) comme

$$\text{Var}[Y] = \sum_{i=1}^k V_i + V_e,$$

où  $V_i$  donne la contribution de la variable  $X_i$  à la variance totale, et  $V_e$  la contribution des termes d'erreur. [64] montre que l'on peut estimer  $V$  et  $V_i$  par

$$\hat{V} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2,$$

$$\hat{V}_i = \frac{1}{N-1} \beta_i^2 \sum_{i=1}^N (X_{ij} - \bar{X}_i)^2.$$

On peut calculer un coefficient de sensibilité

$$S_i = \sqrt{\frac{\hat{V}_i}{\hat{V}}}.$$

Celui-ci est connu sous le nom de *standardize regression coefficient* ou SRC [17].

Si on suppose le modèle monotone, on peut utiliser un autre indicateur connu sous le nom de *standardized rank regression coefficient* ou SRRC. Cela consiste à attribuer 1 à la plus petite valeur de sortie, 2 à la suivante jusqu'à  $N$  à la plus grande valeur. On fait de même pour les valeurs de chaque variable. Ensuite on applique les mêmes calculs que pour les SRC.

Il existe également d'autres coefficients [35] :

— coefficient de corrélation de Pearson :

$$\rho(X_i, Y) = \frac{\sum_{j=1}^N (X_{ij} - \mathbb{E}(X_i))(Y_j - \mathbb{E}(Y))}{\sqrt{\sum_{j=1}^N (X_{ij} - \mathbb{E}(X_i))^2} \sqrt{\sum_{j=1}^N (Y_j - \mathbb{E}(Y))^2}}. \quad (2.32)$$

Ce coefficient cherche à expliciter si le lien entre une variable et la sortie du modèle est linéaire, il vaut 1 ou  $-1$  si elles ont une relation linéaire et 0 si elles sont indépendantes.

— coefficient de corrélation partielle [34] :

$$PCC_i = \rho(X_i - \widehat{X}_{-i}, Y - \widehat{Y}_{-i}), \quad (2.33)$$

où  $\widehat{X}_{-i}$  est la prédiction du modèle linéaire et  $\widehat{Y}_{-i}$  est la prédiction du modèle linéaire lorsque  $X_i$  est absent.

Ces méthodes sont applicables dans notre contexte car les mesures sont calculées à partir d'un nuage de point. On note toutefois qu'elles se basent sur une hypothèse forte, que la fonction étudiée ait un certain caractère linéaire. Il existe des coefficients qui permettent de confirmer cette hypothèse :

— coefficient de détermination  $R^2$  :

$$R^2 = \frac{\sum_{j=1}^N (\hat{Y}_j - \mathbb{E}(Y))^2}{\sum_{j=1}^N (Y_j - \mathbb{E}(Y))^2} \quad (2.34)$$

où  $\hat{Y}_j$  correspond à la prédiction du modèle ;

— coefficient prédictif  $Q^2$  :

$$Q^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^M (Y_j - \widehat{Y}_j)^2}{\sum_{j=1}^M (Y_j - \mathbb{Y})^2}, \quad (2.35)$$

où l'échantillon de taille  $M$  n'a pas été utilisé pour construire le modèle et  $\widehat{Y}_j$  correspond à la prédiction du modèle pour le point  $\mathbf{X}_j = (X_{1j}, \dots, X_{nj})$ .

Ces deux coefficients permettent d'exprimer la part de la variabilité de la sortie de la fonction étudiée qui peut être expliquée par le modèle linéaire.



## 2.5 Méthode basée sur les métamodèles

Lorsque nous voulons étudier la sensibilité d'une boîte noire qui a un long temps d'évaluation, nous n'avons pas accès à un grand nombre de points pour faire notre analyse. L'idée des méthodes basées sur des métamodèles est de trouver un substitut de la boîte noire avec un comportement similaire au modèle étudié mais dont le temps d'évaluation est grandement réduit. On peut alors évaluer le modèle un grand nombre de fois et appliquer l'une ou l'autre méthode d'analyse de sensibilité sur les points obtenus. Il existe un grand nombre de techniques possibles pour créer ce substitut, par exemple un modèle quadratique ou polynomial, l'utilisation de splines ou des modèles de krigeage.

Dans le cadre de ce projet, l'analyse de sensibilité est utilisée pour l'optimisation d'une boîte noire. Nous allons donc décrire des méthodes d'optimisation basées sur des modèles dans la section 3.2.

## 2.6 Analyse en composantes principales

Dans l'introduction de son livre [36], Jolliffe décrit l'idée derrière l'analyse en composante principale comme celle *"de réduire la dimension d'un ensemble de données composées d'un grand nombre de variables liées entre elles, tout en retenant autant que possible la variabilité de l'ensemble de données. Cela est réalisé en le transformant en un nouvel ensemble de variables, les composantes principales, qui sont non-corrélées, et qui sont ordonnées telles que les quelques premières variables retiennent la majorité de la variabilité présentes dans toutes les variables originales"* ([36, chapitre 1], notre traduction).

Concrètement, on suppose  $X$  un vecteur aléatoire de taille  $n$  et on s'intéresse aux liens entre ces variables, leur structure de corrélation ou de covariance. Pour éviter de regarder les  $n$  variances et les  $\frac{n(n-1)}{2}$  covariances ou corrélations, on cherche à regarder  $p \ll n$  nouvelles variables qui retiennent la majeure partie de l'information contenue dans ces covariances.

Dans un premier temps, on cherche une transformation linéaire  $\alpha_1^\top X = \sum_{i=1}^n \alpha_{1,i} X_i$  avec une variance maximale, où  $\alpha_1 \in \mathbb{R}^n$ . Ensuite, on cherche une transformation linéaire  $\alpha_2^\top x$ , non-corrélée avec  $\alpha_1^\top x$ , qui maximise sa variance. La troisième transformation linéaire ne doit être corrélée ni avec  $\alpha_1^\top x$  ni avec  $\alpha_2^\top x$  tout en maximisant sa variance et ainsi de suite. Les vecteurs  $\alpha_i$  sont appelées les composantes principales. On note que l'on peut trouver jusqu'à  $n$  transformations mais on espère que les  $p \ll n$  premières transformations contiendront la majeure partie de la variance de l'ensemble de données.

Le calcul des composantes principales se fait à partir de la matrice de covariance  $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$  du vecteur aléatoire  $X$ . On note  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$  ses valeurs propres. La première composante principale, le vecteur  $\alpha_1 \in \mathbb{R}^n$ , maximise  $\text{Var}[\alpha_1^\top x] = \alpha_1^\top \Sigma \alpha_1$ . Pour s'assurer que  $\alpha_1$  soit unique, on impose que ce dernier soit normé. On cherche donc à résoudre le problème d'optimisation

$$\max_{\alpha_1 \in \mathbb{R}^n} \alpha_1^\top \Sigma \alpha_1 \quad (2.36)$$

$$\text{s. à. } \alpha_1^\top \alpha_1 = 1 \quad (2.37)$$

Pour résoudre ce problème, on introduit le multiplicateur de Lagrange  $\lambda \in \mathbb{R}$  et le Lagrangien

$$\mathcal{L}(\alpha_1, \lambda) = \alpha_1^\top \Sigma \alpha_1 - \lambda(\alpha_1^\top \alpha_1 - 1). \quad (2.38)$$

On impose que le gradient de (2.38) soit nul,

$$\Sigma \alpha_1 - \lambda \alpha_1 = 0 \iff (\Sigma - \lambda I_n) \alpha_1 = 0,$$

où  $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  est la matrice identité. Le multiplicateur de Lagrange  $\lambda$  est donc une valeur propre de  $\Sigma$  et  $\alpha_1$  le vecteur propre correspondant. La quantité à maximiser étant

$$\alpha_1^\top \Sigma \alpha_1 = \alpha_1^\top \lambda \alpha_1 = \lambda \alpha_1^\top \alpha_1 = \lambda,$$

le multiplicateur de Lagrange  $\lambda$  vaut la plus grande valeur propre de  $\Sigma$ ,  $\lambda = \lambda_1$ , et  $\alpha_1$  le vecteur propre correspondant.

Pour trouver la deuxième composante principale  $\alpha_2 \in \mathbb{R}^n$ , on doit résoudre un problème d'optimisation similaire à (2.37), en ajoutant une contrainte. En effet, les composantes principales doivent être non-corrélées entre elles. On impose donc que

$$\text{Cov}[\alpha_1^\top X, \alpha_2^\top X] = \alpha_1^\top \Sigma \alpha_2 = \alpha_2^\top \Sigma \alpha_1 = \alpha_2^\top \lambda_1 \alpha_1 = \lambda_1 \alpha_2^\top \alpha_1 = 0. \quad (2.39)$$

En ajoutant une contrainte de normalisation sur  $\alpha_2$ , on obtient le problème

$$\max_{\alpha_2 \in \mathbb{R}^n} \alpha_2^\top \Sigma \alpha_2 \quad (2.40)$$

$$\text{s. à. } \alpha_2^\top \alpha_2 = 1 \quad (2.41)$$

$$\alpha_2^\top \alpha_1 = 0 \quad (2.42)$$

Pour le résoudre, on introduit deux multiplicateurs de Lagrange  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$  et le Lagrangien

$$\mathcal{L}(\alpha_2, \lambda, \mu) = \alpha_2^\top \Sigma \alpha_2 - \lambda(\alpha_2^\top \alpha_2 - 1) - \mu \alpha_2^\top \alpha_1.$$

On annule son gradient par rapport à  $\alpha_2$  et on obtient l'équation

$$\Sigma \alpha_2 - \lambda \alpha_2 - \mu \alpha_1 = 0. \quad (2.43)$$

On peut multiplier cette équation par  $\alpha_1^\top$  et on obtient

$$\alpha_1^\top \Sigma \alpha_2 - \lambda \alpha_1^\top \alpha_2 - \mu \alpha_1^\top \alpha_1 = 0.$$

Puisque  $\alpha_1^\top \alpha_1 = 1$  (2.37),  $\alpha_1^\top \alpha_2 = 0$  (2.42) et  $\alpha_1^\top \Sigma \alpha_2 = 0$  (2.39), l'équation se réduit à  $\mu = 0$ . Alors (2.43) devient

$$\Sigma \alpha_2 - \lambda \alpha_2 = 0 \iff (\Sigma - \lambda I_n) \alpha_2 = 0,$$

et  $\lambda$  est également une valeur propre de  $\Sigma$  et  $\alpha_2$  son vecteur propre correspondant. On cherche à avoir  $\lambda_2$  le plus grand possible et les vecteurs propres de  $\Sigma$ ,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ , doivent satisfaire  $\alpha_2^\top \alpha_1 = 0$ . Dès lors,  $\lambda_2$  correspond à la deuxième plus grande valeur propre de  $\Sigma$ ,  $\lambda = \lambda_2$ , et  $\alpha_2$  à son vecteur propre correspondant.

On peut avoir un raisonnement similaire pour les  $(n - 2)$  composantes principales suivantes, qui correspondront aux  $(n - 2)$  vecteurs propres associés aux  $(n - 2)$  valeurs propres de  $\Sigma$  suivantes, ordonnées par ordre décroissant.

Alors, pour  $k = 1, 2, \dots, n$ , la  $k^e$  composante principale est  $z_k = \alpha_k^\top x$  où  $\alpha_k$  est le vecteur propre de  $\Sigma$  associé à sa  $k^e$  plus grande valeur propre  $\lambda_k$ . De plus, si  $\alpha_k$  est unitaire,  $\text{Var}[z_k] = \lambda_k$ .

Si  $\Sigma$  n'est pas connue, elle peut être estimée grâce à un échantillon de réalisations du vecteur aléatoire  $X$ . A partir d'un nuage de  $N$  points, on estime une matrice de covariance. On suppose que  $D$  est une matrice  $N$  lignes  $n$  colonnes. Chaque ligne représente une observation des variables aléatoires. Une estimation de la matrice de covariance serait une matrice  $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$  où

$$S_{ij} = \frac{1}{N-1} \sum_{l=1}^N (D_{li} - \bar{D}_i)(D_{lj} - \bar{D}_j),$$

où  $\bar{D}_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{ij}$  est la moyenne des réalisations de la  $j^e$  variable aléatoire.

Les composantes principales peuvent être utilisées pour mettre en avant une certaine source de variations issues d'un groupe de variables particuliers, comme décrit dans [36, Chapitre 4]. Dans cet exemple, une série de 7 mesures du corps humain ont été prises sur un groupe de 28 personnes. La première composante principale illustre que la plus grande partie de la variation dans les données vient du fait que certains individus sont globalement plus grand que d'autres. La deuxième par contre, illustre que la qu'une grande partie de la variation résultante vient du fait que les individus ont des grandes mains et poignets comparés à leur taille, ou l'inverse.

Dans le cadre de ce projet, nous cherchons à optimiser des boîtes noires. Dans ce contexte, une analyse en composantes principales pourrait être utiliser pour en apprendre plus sur la boîte noire que l'on cherche à minimiser. En effet, une telle analyse pourrait être appliquer pour déterminer des liens entre les variables, et plus particulièrement des liens entre les variables et l'objectif. Un des avantage de l'analyse en composante principale est quelle peut s'appliquer à un nuage de points. Il ne sera donc pas nécessaire de d'utiliser des évaluations pour faire cette analyse. De plus, lors de l'analyse, des combinaisons de variables apparaissent naturellement, ce qui pourra être exploiter par la suite.