



HAL
open science

Développement de méthodes statistiques pour la prédiction d'un gabarit de signature infrarouge

Suzanne Varet

► **To cite this version:**

Suzanne Varet. Développement de méthodes statistiques pour la prédiction d'un gabarit de signature infrarouge. Mathématiques [math]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2010. Français. NNT : . tel-00511385

HAL Id: tel-00511385

<https://theses.hal.science/tel-00511385>

Submitted on 24 Aug 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université
de Toulouse

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse III - Paul Sabatier

Discipline : Mathématiques appliquées

Spécialité : Statistiques

Présentée et soutenue par Suzanne Varet

Le 8 avril, 2010

Développement de méthodes statistiques pour la
prédiction d'un gabarit de signature infrarouge

JURY

Jean-Claude Fort (Université Paris V),	rapporteur
Pierre L'Ecuyer (Université de Montréal),	rapporteur
Serge Cohen (Université Toulouse III),	directeur de thèse
Josselin Garnier (Université Paris VII),	examineur
Sidonie Lefebvre (Onera),	examineur
Antoine Roblin (Onera),	examineur
Philippe Sigaud (DGA),	examineur

École doctorale : Mathématiques Informatique Télécommunications de Toulouse

Unité de recherche : Laboratoire de Statistiques et Probabilités

Directeur de thèse : Serge Cohen

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	iii
NOTATIONS	viii
LISTE DES SIGLES	ix
REMERCIEMENTS	xi
INTRODUCTION	1
I Quelques résultats classiques sur la réduction de dimension et l'intégration numérique	7
CHAPITRE 1 : LA RÉDUCTION DE DIMENSION	9
1.1 Les plans d'expériences	10
1.1.1 Le modèle linéaire	10
1.1.2 Généralités sur les plans d'expériences	12
1.1.3 Les plans factoriels	14
1.1.4 Les hypothèses d'applications	21
1.2 L'analyse de variance fonctionnelle	22
1.3 Conclusion	29
CHAPITRE 2 : L'INTÉGRATION NUMÉRIQUE	31
2.1 La méthode de Monte Carlo	32
2.2 Échantillonnage par hypercube latin	35
2.3 La méthode de Quasi-Monte Carlo	38
2.3.1 La discrépance	39
2.3.2 Estimation d'erreur	44
2.3.3 Les suites à discrépance faible	52

2.3.4	La randomisation	66
2.3.5	Algorithmes d'optimisation pour la discr�panance	70
2.4	Conclusion	73
II Int�gration num�rique adapt�e � une fonction d'int�r�t		75
CHAPITRE 3 : ANALYSE DE SENSIBILIT� ET DIMENSION EFFEC-		
TIVE		77
3.1	M�thode de calcul des indices de Sobol � partir d'un plan d'exp�riences fac-	
	toriel fractionnaire � deux niveaux	77
3.2	Comparaisons num�riques entre indices de Sobol et indices de Sobol fraction-	
	naires	85
3.2.1	Cas d'un test lin�aire	85
3.2.2	Cas d'un test non-lin�aire monotone	86
3.2.3	Cas d'un test non-lin�aire non-monotone	89
3.2.4	Contre-exemple	90
3.3	Conclusion	92
CHAPITRE 4 : CRIT�RE DE S�LECTION D'UNE SUITE D�DI�E � LA		
FONCTION D'INT�R�T		93
4.1	Introduction	93
4.2	D�finition	94
4.3	R�sultats de tests num�riques	97
4.3.1	Cas lin�aire avec interactions	97
4.3.2	Cas d'une indicatrice	107
4.3.3	Contre-exemples	110
4.4	Conclusion	112
CHAPITRE 5 : D�VELOPPEMENT D'UN ALGORITHME DE S�LEC-		
TION DE POINTS ADAPT�S � LA FONCTION D'INT�-		
R�T		115

5.1	Optimisation de la discr�pance effective	116
5.1.1	Recuit simul� pour la discr�pance effective	116
5.1.2	Algorithme incr�mental sur crit�re de discr�pance effective	118
5.2	R�sultats de tests num�riques	120
5.2.1	Fonction quadratique	121
5.2.2	Indicatrice en petite dimension	128
5.2.3	Indicatrice en grande dimension	134
5.3	Conclusion	139
 III Application		143
 CHAPITRE 6 : APPLICATION � L'ESTIMATION D'UN GABARIT DE SIGNATURE INFRAROUGE		145
6.1	Estimation des indices de Sobol	150
6.2	Comparaison des erreurs logicielles et statistiques	158
6.3	R�sultats num�riques de l'estimation du gabarit de SIR	160
6.4	Conclusion	172
 CONCLUSION		175
 LISTE DES TABLEAUX		xix
 LISTE DES FIGURES		xxi
 LISTE DES ANNEXES		xxv
 BIBLIOGRAPHIE		xxix

NOTATIONS

$\lfloor \cdot \rfloor$ partie entière inférieure. 52

α_u fonction issue de la décomposition FANOVA. 23

$A(t, x)$ nombre de points de la suite x qui appartiennent au pavé $P = [0, t]$. 39

β vecteur des k effets β_u du modèle. 11

$\hat{\beta}$ estimateur de β . 16

$D_{\infty,*}(x)$ discrédance infinie à l'origine des n premiers points de la suite x . 40

$D_{L_2,*}(x)$ discrédance carrée moyenne à l'origine des n premiers points de la suite x . 42

$D_{L_2,*,\gamma}(x)$ discrédance pondérée des n premiers points de la suite x . 43

ε variable aléatoire centrée de variance σ représentant l'erreur expérimentale. 15

$\vec{\varepsilon}$ vecteur de dimension n des erreurs ε_i . 11

ε_i résidu du modèle linéaire pour la $i^{\text{ème}}$ expérience. 10

φ fonction radicale inverse. 52

f fonction représentant le code. 12

$F_{b,B}$ suite de Faure en base b . 59

H_{b_1,\dots,b_s} suite de Halton en bases b_1, \dots, b_s . 54

H_{n,b_1,\dots,b_s} séquence de Hammersley de n points en bases b_1, \dots, b_s . 56

I intégrale d'une fonction à valeur réelles, dont on souhaite estimer la valeur. 32

I_n^{LHS} estimateur de l'intégrale I à l'aide d'un hypercube latin. 36

I_n^{MC} estimateur Monte Carlo de l'intégrale I . 32

I_n^{QMC} estimateur de l'intégrale I à l'aide d'une suite à discrédance faible. 38

IS_u indice de Sobol du $|u|$ -uplet des variables indicées dans u . 24

$IS_{u_i}^{frac}$ indices de Sobol évalués à l'aide d'un plan factoriel fractionnaire. 83

k nombre de fonctions de régression du modèle. 10

$\lambda(P)$ volume du pavé P . 40

M matrice d'expérience. 11

n nombre d'exécutions du code. 13, 32

N_b suite de Niederreiter en base b . 64

$nbNiv_j$ nombre de niveaux pour le facteur X^j . 14

P pavé de l'hypercube unité. 39

p_1 nombre de facteurs de base d'un plan factoriel fractionnaire. 19

p_2 nombre de facteurs définis d'un plan factoriel fractionnaire. 19

P_b pavé élémentaire en base b . 60

s dimension de l'espace de départ. 10, 12

S suite de Sobol. 58

$\mathcal{U}([0, 1]^s)$ loi uniforme sur $[0, 1]^s$. 32

VDC_b suite de Van Der Corput en base b . 53

x séquence de n points en dimension s . 32

$X = (X^1, \dots, X^s)$ variables d'entrée du code. 12

x_i vecteur de dimension s correspondant aux valeurs des s variables pour la $i^{\text{ème}}$ expérience.

10

X^u variable indiquée dans u si $|u| = 1$ ou interaction entre les variables indiquées dans u si $|u| > 1$. 15

Y réponse. 10

\vec{y} vecteur des n observations y_i de y . 11

y_i observation de la réponse pour la $i^{\text{ème}}$ expérience. 10

LISTE DES SIGLES

- ANOVA** ANalysis Of VAriance. 5
- CRIRA** Calcul du Rayonnement InfraRouge des Avions. 2
- FANOVA** Functional ANalysis Of VAriance. 28
- FAST** Fourier Amplitude Sensitivity Test. 25
- FC** Factoriel Complet (plan). xxiv, 14
- FF** Factoriel Fractionnaire (plan). 19
- i.i.d.** indépendantes et identiquement distribuées. 32
- LHS** Latin Hypercube Sampling. 35
- MC** Monte Carlo. 3
- MCP** Moindres Carrés Pondérés. 11
- MV** Maximum de Vraisemblance. 11
- QMC** Quasi-Monte Carlo. 38
- RKHS** Reproducing Kernel Hilbert Space. 44
- SIR** Signature InfraRouge. 1
- SSR** Sum Square Residual. 17

REMERCIEMENTS

Je souhaite remercier tout d'abord les rapporteurs de mon manuscrit de thèse, M. Pierre L'Ecuyer et M. Jean-Claude Fort. Les questions que vous avez pu soulever ainsi que vos remarques et suggestions m'ont permis d'enrichir ma réflexion sur mon sujet. Je remercie également M. Josselin Garnier d'avoir accepté de présider le jury de ma soutenance ainsi que M. Philippe Sigaud pour m'avoir fait l'honneur de sa présence.

Un grand merci à Antoine, Sidonie et Serge sans qui ce travail n'aurait pas pu voir le jour. Antoine, merci de m'avoir permis de rejoindre l'équipe MPSO et de m'avoir permis d'élargir mes connaissances en physique. Sidonie, merci de t'être toujours rendue disponible et pour t'être autant investie dans mon travail de thèse. Serge, merci pour votre honnêteté et votre confiance vis-à-vis de mon travail et d'avoir su me faire partager la valeur de la recherche.

Je remercie toute l'équipe MPSO pour m'avoir aussi bien accueillie et pour m'avoir encouragée durant les trois ans de thèse. Merci Gérard pour tes explications sur la physique de la détection infrarouge et pour la patience dont tu as fait preuve pour m'expliquer l'ensemble de ces concepts. J'espère en retour ne pas t'avoir trop ennuyé avec mes discrédances. Merci Sandrine, qui partage mon goût pour les mathématiques appliquées, de m'avoir encouragée et conseillée tout au long de ma thèse. Merci Valérie pour ta gentillesse et pour avoir fait preuve de tant d'intérêt pour mon sujet. Merci Claire L. pour les discussions quotidiennes après déjeuner et pour m'avoir fait partager ta propre expérience. Merci Karine pour ton calme rassurant, pour ton soutien et tes conseils avisés. Merci Claire M., Pierre, Luc, Patrice et Patrick pour votre sens de l'humour, pour votre soutien et vos encouragements.

Merci à mes camarades de promotion, qui ont débroussaillé le chemin de la soutenance avant moi : Guillaume et Bruno, Sophie et Julien, je ne vous embêterai plus avec mes questions sur le \LaTeX , Baya, merci pour le JDV, pour les pauses chocolat et pour les com-mérages, Carine, merci de m'avoir supporté dans ton bureau durant tout ce temps et pour les nombreuses discussions et fous rires.

Je remercie ma famille pour son soutien : ma sœur, Julia, pour m'avoir autant aidé sur la logistique de la soutenance et pour avoir su répondre présent dans les moments de doute,

mes parents, pour leur soutien et leur compréhension. Merci à mes grands parents, Denise et Jean, pour votre confiance et vos précieux conseils. Et enfin, à celui qui partage ma vie, merci d'avoir cru en moi et pour ton soutien indéfectible.

INTRODUCTION

Le développement rapide des technologies informatiques a permis, dans divers domaines tels que la physique, la biologie ou la chimie, de simuler avec précision des phénomènes réels complexes. Ainsi les simulateurs numériques, fondés sur des modèles mathématiques représentant la réalité, permettent de compléter, voire remplacer, les mesures expérimentales. L'amélioration continue et la sophistication de ces logiciels conduit, la plupart du temps, à un jeu de données d'entrée important. Or, ces données sont plus ou moins bien connues. En outre, les praticiens cherchent à optimiser l'utilisation de ces codes numériques pour prendre des décisions ou plus généralement pour analyser les performances d'un système. En raison de cette incertitude sur les données d'entrées, il peut être avantageux de s'intéresser à une description en termes probabilistes des résultats de la simulation plutôt qu'à une valeur précise obtenue pour un jeu de données fixé [dRDT08]. Par ailleurs, plus le nombre de paramètres d'entrée est élevé, plus il est difficile de visualiser lesquels ont une réelle importance sur le résultat de la simulation. On peut alors être amené à étudier le comportement de la sortie du code lors de variations de chacune des données d'entrée [SCS00]. De plus, la complexité des calculs rendant le temps d'exécution des codes souvent long, le développement d'un modèle réduit peut s'avérer nécessaire [SPKA01].

Dans notre cas, nous nous intéressons au dimensionnement de capteurs optroniques sensibles dans l'infrarouge pour des applications militaires relatives à la détection d'aéronefs. La connaissance de la signature infrarouge (nous utiliserons l'abréviation SIR) est essentielle pour prédire les performances des systèmes infrarouges en terme de détection dans différentes situations de combats. Nous appelons signature d'un aéronef, l'ensemble des quantités nécessaires à la prédiction du signal observé par un capteur lorsque l'aéronef est dans son champ de vision. Dans le cadre des applications militaires, deux points de vue sont à envisager. Le premier point de vue est celui du détenteur d'un aéronef. Son objectif est alors d'évaluer la sécurité de son aéronef en environnement hostile. Dans ce cas, il est nécessaire d'évaluer les effets, sur la SIR, de différentes solutions de furtivité visant à diminuer sa signature, afin d'empêcher ou de retarder sa détection par un système optronique adverse. Les caractéristiques de l'aéronef sont alors bien connues et seules les conditions environnementales

peuvent varier. Le second point de vue est celui du concepteur de capteurs optroniques. Celui-ci cherche à connaître la SIR de différents aéronefs pour déterminer les performances de détection de son système de surveillance. Les caractéristiques de chacun des aéronefs sont alors mal connues, et la SIR doit être évaluée en prenant en compte l'incertitude sur ces caractéristiques. De plus, les capteurs pouvant être utilisés dans des conditions météorologiques très différentes, la SIR doit être évaluée pour un large ensemble de conditions atmosphériques. La confrontation entre un capteur optronique et un aéronef est caractérisée par un scénario qui définit, par exemple, le type d'aéronef et la géométrie d'approche. Cependant, un grand nombre de données, qui peuvent avoir un impact sur la SIR, ne sont pas définies par le scénario, comme les conditions météorologiques ou certaines caractéristiques de l'avion. Par conséquent, il n'est pas possible d'évaluer les performances d'un capteur à partir d'un unique jeu de données fixé, les incertitudes sur les caractéristiques de l'aéronef et sur son environnement doivent être prises en compte. Plusieurs raisons rendent l'approche expérimentale difficilement réalisable pour évaluer la dispersion de la SIR. Tout d'abord, il est nécessaire d'évaluer la SIR dans un grand nombre de situations différentes. De plus, les aéronefs sont rarement disponibles. Enfin, certaines configurations ne peuvent être mises en place facilement dans le cadre d'une expérimentation pour des raisons de sécurité. Par conséquent, le seul moyen d'obtenir la SIR dans un grand nombre de conditions est d'utiliser un simulateur.

L'Onera a développé un code informatique, CRIRA (Calcul du Rayonnement InfraRouge des Avions) [Gau81][BDG⁺82], permettant de calculer la signature infrarouge d'un aéronef dans son environnement. Ce code considère en entrée un grand nombre de variables, environ une soixantaine, décrivant les caractéristiques de l'aéronef et de son environnement. Les variables d'entrée peuvent être continues, comme l'altitude de vol, ou discrètes, comme la présence ou non de nuages. Certaines d'entre elles peuvent être corrélées, comme la température de l'air et l'humidité relative. Le code CRIRA renvoie en sortie la SIR correspondante. Plus précisément, la quantité obtenue en sortie correspond à la différence entre le flux reçu par un capteur qui voit l'avion et le flux reçu par un capteur qui ne le voit pas. L'ensemble des scénarios envisagés fixe la distance avion-capteur. Comme nous cherchons à détecter l'avion le plus tôt possible, c'est-à-dire à grande distance, son image est de l'ordre de la

taille d'un pixel dans le plan image. Dans ce cas d'objet non résolu spatialement, le signal infrarouge de l'avion se résume à la valeur du signal enregistré sur un seul pixel. Le contraste entre l'avion et le fond en arrière plan peut donc être défini par une seule grandeur scalaire appelée éclairement différentiel. Jusqu'à présent, le code CRIRA fournissait une valeur d'éclairement différentiel pour un jeu de données d'entrée connues. L'Onera a donc entrepris un programme de travail visant à prédire la dispersion statistique de l'éclairement différentiel pour un aéronef partiellement connu placé dans un environnement non défini par des valeurs précises. Parmi les variables mal connues, certaines sont décrites uniquement par leur densité de probabilité, comme les variables météorologiques, pour d'autres, on ne connaît que leur intervalle de variation. Nous souhaitons donc pouvoir évaluer, non pas une valeur de SIR, mais un ensemble de valeurs représentatives de l'incertitude sur les données d'entrées. Or, cet ensemble de valeurs de signatures infrarouges est indispensable au dimensionnement d'un capteur futur.

On notera que, même si le contraste entre la cible et le fond est parfaitement connu, l'étape de détection, qui consiste à déclarer la présence d'une cible dans le champ du capteur, est un processus aléatoire, en raison des différentes sources de bruit (fluctuations spatiales du fond, bruit de photons, bruits introduits par le détecteur). Dans le cas scalaire que nous considérons, la détection consiste à réaliser un test à seuil : si l'éclairement différentiel de la cible est supérieur à un seuil, le système déclarera la présence d'une cible, et dans le cas contraire, le système n'émettra aucun signal d'alarme. A ce processus aléatoire vient se superposer le fait que les données d'entrée nécessaires au calcul de l'éclairement différentiel ne sont pas parfaitement connues. En conséquence, nous cherchons uniquement à quantifier la dispersion de l'éclairement différentiel de la cible due à la dispersion des données d'entrée du code CRIRA (figure 1), que nous appellerons aussi gabarit de SIR.

La recherche de la dispersion de la SIR se ramène au calcul de la fonction de répartition de la sortie du code, à savoir l'estimation d'une infinité d'intégrales, chacune intégrant une fonction de forme analytique inconnue h définie sur un espace de grande dimension s . Nous nous intéressons plus particulièrement à la probabilité de dépassement de seuil de la SIR pour un certain nombre de seuils, ce qui nous conduit à l'estimation d'un nombre fini d'intégrales. La première idée serait d'utiliser la méthode Monte Carlo (MC) qui consiste

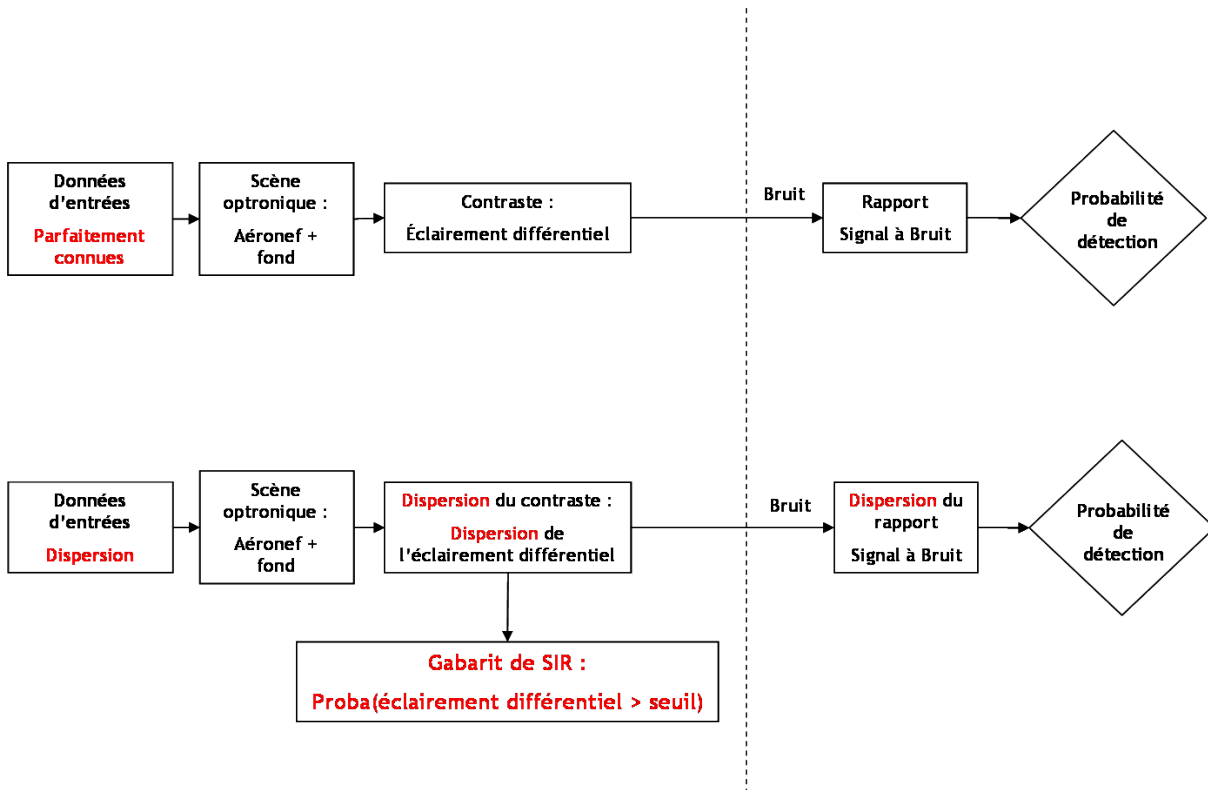


Figure 1 – Illustration de la différence entre la probabilité de détection usuelle et le gabarit de SIR

à approcher chaque intégrale par une moyenne empirique des valeurs de la fonction h en n points pris aléatoirement et selon une loi uniforme. La vitesse de convergence de la méthode Monte Carlo, donnée par le théorème centrale limite, est en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$. Il existe également des variantes de cette méthode permettant de tirer les points selon une densité choisie a priori. Cependant, pour le code numérique dont nous disposons, pour des raisons de coût, la taille de l'échantillon des réalisations de h est limitée. La précision de l'estimateur de chaque intégrale n'est alors plus toujours satisfaisante. Quand la dimension du problème est petite (l'ordre de grandeur maximal de la dimension, communément admis, est d'environ $s = 10$), elle peut être améliorée par la méthode dite de quasi-Monte Carlo (QMC) [MC95], où le choix des points suit une stratégie déterministe visant à représenter de manière uniforme l'espace des variables. Lorsque la dimension s est élevée, en théorie, la qualité de l'estimateur QMC se dégrade par rapport à celle de l'estimateur MC en raison de sa vitesse de convergence en

$\mathcal{O}\left(\frac{(\log(n))^s}{n}\right)$ [Hla61]. Cependant, plusieurs études ont montré que la méthode QMC pouvait donner de meilleurs résultats que la méthode Monte Carlo même en grande dimension [PT95], [NT96], [CMO97], [ABG98], [L'E04], [IT06]. D'après Caffisch, Morokoff et Owen [CMO97], la fonction d'intérêt ne dépend souvent en réalité que d'un faible nombre de variables ou n'est constituée que d'une somme de fonctions définies sur des espaces de faible dimension, ce qui pourrait expliquer cette performance. De plus, certaines projections des points des suites utilisées pour la méthode QMC sur des sous-espaces $[0, 1]^d$ de dimension d faible par rapport à la dimension initiale s , présentent des irrégularités de répartition [MC94] et [KW97]. Il est alors facile d'imaginer que si la fonction dépend beaucoup d'une variable sur laquelle la projection des points de la suite est mal échantillonnée, la précision des résultats sera moins bonne qu'avec une suite bien échantillonnée sur cette projection. Cette idée renforce la nécessité de connaître les variables significatives pour la fonction d'intérêt avant d'appliquer la méthode QMC. Ainsi Morokoff, Caffisch et Owen [CMO97] ont développé la notion de dimension effective correspondant au nombre de variables dont la variation entraîne une importante variation de la fonction d'intérêt. La recherche des variables significatives s'apparente alors à une réduction de dimension. Pour déterminer les variables significatives, il existe différentes approches, comme les plans d'expériences ou l'ANOVA (Analysis of Variance) fonctionnelle. Cependant, la validité de ces approches nécessite des hypothèses qui sont contestables quand on s'intéresse à la prédiction d'un gabarit de SIR. L'ANOVA fonctionnelle repose sur l'hypothèse d'indépendance des variables d'entrée [SCS00]. Or, certaines variables en entrée du code CRIRA peuvent être corrélées. De plus nous ne disposons pas de données suffisantes pour estimer la loi jointe de ces variables. L'approche par plan d'expériences nécessite de supposer la SIR gaussienne [DFS02]. Or, une étude a montré que la SIR ne pouvait pas être considérée gaussienne [Lef06]. Enfin, l'étude de la significativité des variables n'a été jusqu'à présent utilisée que pour prédire un éventuel gain de précision de la méthode QMC par rapport à la méthode MC [LO06]. A notre connaissance, elle n'a jamais été utilisée directement pour améliorer la précision de l'estimateur de chaque intégrale d'intérêt. L'efficacité de la méthode QMC dépend donc du nombre de variables significatives et de la manière dont elles sont échantillonnées. Toutefois, les méthodes existantes pour déterminer les variables significatives ne sont pas adaptées à la SIR. De plus, l'information

obtenue lors de cette étape de réduction de dimension reste sous-exploitée.

Notre objectif consiste à élaborer une nouvelle méthode pour identifier la significativité des variables dont les hypothèses de validité sont moins contraignantes que celles des méthodes usuelles et adaptée à l'estimation d'un gabarit de SIR (non indépendance des variables, loi jointe inconnue, non gaussiannité de la SIR, grand nombre de variables). Par la suite, dans le cadre de la méthode QMC, nous avons cherché à utiliser le classement des variables, obtenu lors de l'étape de réduction de dimension, pour améliorer la qualité de répartition des projections significatives. Nous espérons ainsi augmenter la précision de l'estimateur de chaque intégrale.

Ce mémoire est divisé en trois parties. Nous rappelons dans la première partie quelques résultats classiques sur la réduction de dimension et l'intégration numérique. Plus précisément, nous détaillons dans le chapitre 1 les hypothèses d'application des méthodes de réduction de dimension par plan d'expériences et par ANOVA fonctionnelle. Le chapitre 2 présente la méthode quasi-Monte Carlo et ses variantes. La deuxième partie est consacrée à la présentation de notre démarche. Elle a consisté, dans un premier temps à mettre au point une méthode de réduction de dimension adaptée au code CRIRA (chapitre 3) en terme de dimension et d'hypothèse d'application. Par la suite, nous avons utilisé l'information obtenue lors de la réduction de dimension pour définir un nouveau critère permettant d'évaluer l'adéquation d'une suite, en terme de qualité de répartition des projections des points, à la fonction d'intérêt h (chapitre 4). Nous utilisons ensuite ce critère pour construire une suite de points adaptée à la fonction d'intérêt (chapitre 5). Enfin, la troisième partie de ce mémoire est consacrée à l'application de notre démarche pour l'estimation d'un gabarit de SIR.

Première partie

Quelques résultats classiques sur la réduction de dimension et l'intégration numérique

CHAPITRE 1

LA RÉDUCTION DE DIMENSION

Nous souhaitons estimer la valeur de l'intégrale d'une fonction dont la forme analytique est inconnue. La méthode d'intégration numérique QMC peut, sous certaines conditions, grâce à une vitesse de convergence plus rapide, être plus performante que la méthode MC. De manière générale, la méthode QMC s'avère plus efficace que MC lorsque la dimension de l'espace de définition de la fonction d'intérêt n'est pas trop élevée (inférieure à 10) ou que la fonction d'intérêt peut se décomposer en une somme de fonctions définies sur des espaces de faible dimension. Dans notre cas, la dimension est égale au nombre de paramètres d'entrée du code qui ne sont pas fixés par le scénario, en l'occurrence une trentaine. Ainsi, afin de garantir la précision de l'estimateur QMC, nous souhaitons réduire le nombre de variables avant d'appliquer la méthode d'intégration numérique. Les méthodes usuelles, dites 'de réduction de dimension', telles que l'analyse en composante principale ou la méthode des projections révélatrices exploratoires, ont pour but de trouver d transformations (souvent linéaires) des s variables initiales telles que $d < s$ et qui capturent le plus d'information possible, selon différents critères, contenue dans les variables initiales. Cependant, l'interprétation physique des transformations obtenues peut s'avérer difficile. C'est pourquoi, dans notre situation, la réduction de dimension consiste à déterminer, non pas des transformations des variables initiales, mais directement les variables les plus influentes pour le calcul de SIR. Dans ce but, nous nous intéressons à deux approches distinctes : l'approche par plan d'expériences et l'approche par analyse de variance fonctionnelle. Ce chapitre a pour objectif de détailler chacune de ces approches et de mettre en évidence les hypothèses nécessaires à leur application.

La première section de ce chapitre est consacrée à l'approche par plan d'expériences. Nous commençons par aborder les notions liées au modèle linéaire. Puis, nous étudions une classe de plans particulière : les plans factoriels. La deuxième section de ce chapitre est consacrée à l'approche par analyse de variance fonctionnelle. En particulier, nous définissons les indices de Sobol qui seront utilisés par la suite.

1.1 Les plans d'expériences

La plupart des plans d'expériences utilisent un modèle a priori pour établir une relation entre les entrées et la sortie. C'est pourquoi avant d'étudier plus en détail les plans d'expériences, nous commençons par rappeler les principes du modèle de régression linéaire. Celui-ci, qui présente l'avantage de la simplicité, est aussi souvent le mieux adapté lorsqu'on ne dispose d'aucune information sur la relation entrée/sortie.

1.1.1 Le modèle linéaire

Pour exprimer la relation qui lie une réponse continue Y à s variables explicatives continues X^j , $j = 1, \dots, s$, on peut utiliser le modèle de régression linéaire :

$$y_i = {}^t g(x_i)\beta + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

où

- y_i : est l'observation de Y pour la $i^{\text{ème}}$ expérience. y_i est considérée comme une variable aléatoire réelle.
- x_i : vecteur ligne de dimension s dont les composantes sont les valeurs des s variables explicatives pour la $i^{\text{ème}}$ expérience, $x_i = (x_i^1, \dots, x_i^s)$.
- $g(x_i)$: vecteur colonne de dimension k , $k \geq s$, dont les composantes sont les valeurs des k fonctions de régression, pour la $i^{\text{ème}}$ expérience (${}^t g(x_i)$ étant la transposée du vecteur $g(x_i)$).
- β : est le vecteur colonne des k coefficients du modèle que l'on cherche à estimer.
- ε_i : est l'erreur expérimentale pour la $i^{\text{ème}}$ expérience. ε_i est considérée comme une variable aléatoire d'espérance nulle et de variance σ_i^2 . Les ε_i , $i = 1, \dots, n$, sont indépendantes et leur loi est supposée connue.

Par exemple, pour le modèle

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X^1 + \beta_2 X^2 + \beta_3 X^3 + \beta_{11} (X^1)^2 + \beta_{23} X^2 X^3 + \beta_4 \log X^3 + \varepsilon$$

on a $s = 3$ variables explicatives $X = (X^1, X^2, X^3)$, $k = 7$ et les fonctions de régression sont : $g_0(X) = 1$, $g_1(X) = X^1$, $g_2(X) = X^2$, $g_3(X) = X^3$, $g_4(X) = (X^1)^2$, $g_5(X) = X^1 X^3$, $g_6(X) = \log X^3$.

En supposant que l'on ait effectué n expériences, sous forme matricielle ce modèle s'écrit :

$$\vec{y} = M\beta + \vec{\varepsilon} \quad (1.2)$$

où

- \vec{y} : est le vecteur colonne de dimension n des n observations y_i
- M : est la matrice $n \times k$ du modèle dont les lignes i correspondent à $g(x_i)$ pour $i = 1, \dots, n$
- β : est le vecteur colonne des k coefficients du modèle que l'on cherche à estimer
- $\vec{\varepsilon}$: est le vecteur colonne de dimension n des erreurs ε_i d'espérance nulle et de matrice de variance-covariance Σ de terme diagonal σ_i^2 , pour $i = 1, \dots, n$ et 0 ailleurs.

Pour estimer le vecteur β , il est possible d'utiliser différents estimateurs tels que le maximum de vraisemblance (MV) ou celui des moindres carrés éventuellement pondérés (MCP). Il est classique de considérer les résidus ε_i gaussiens car, d'une part, la plupart des bruits observés lors d'expérimentations s'avèrent suivre une loi gaussienne et d'autre part, cette hypothèse simplifie le développement de la théorie. Notons que, dans ce cas, les estimateurs MCP et MV coïncident. De plus, l'estimateur MV est asymptotiquement efficace (dans le sens où sa variance converge vers la borne de Cramer-Rao [Sap06]). Ainsi, lorsque les résidus ε_i ne sont pas gaussiens, l'estimateur MV est asymptotiquement meilleur que l'estimateur MCP. Cependant, lorsqu'on ne dispose d'aucune information sur la distribution des résidus le seul estimateur disponible est celui des moindres carrés. Nous avons choisi de calculer l'estimateur des moindres carrés de β à partir des valeurs observées aux points d'un plan d'expériences. Plus précisément, nous avons choisis un plan factoriel. Cette catégorie de plans permet d'étudier les interactions et est adapté au cas d'un code de calcul. Notons que, dans ce chapitre, n désignera le nombre d'expériences du plan d'expériences.

1.1.2 Généralités sur les plans d'expériences

Lors d'expérimentations utilisant des données réelles, les expériences dont on souhaite analyser les résultats sont souvent réalisées pour mesurer les effets d'un ou plusieurs facteurs (appelés aussi variables) sur une réponse. Notre but étant de réduire la dimension, il est nécessaire d'analyser les effets des différents facteurs afin de séparer les facteurs significatifs pour la réponse des facteurs non significatifs. Le criblage (ou screening) correspond à l'étude de l'importance des différents facteurs sur la réponse. Dans ce but, il est important de construire des expériences qui peuvent fournir des informations avec un coût raisonnable. L'utilisation d'une approche directe, qui consiste à évaluer l'impact du changement de la valeur de chaque facteur l'un après l'autre, peut se révéler très coûteuse en terme de nombre d'expériences. C'est ainsi que Fisher en 1935 [Fis35] a introduit les plans d'expériences. On peut définir un plan d'expériences comme une sélection de combinaisons de valeurs des facteurs qui fournira, à moindre coût, des informations sur la relation entrée-sortie. Bien que définis initialement pour l'expérimentation réelle, les plans d'expériences peuvent être étendus au contexte des expériences issues de simulateurs, que l'on nommera expériences numériques ou simulées par opposition aux expériences réelles. Afin de détailler la construction de quelques plans d'expériences adaptés aux codes numériques, nous allons maintenant introduire quelques notations et termes de vocabulaire utilisés dans le cadre des plans d'expériences. Certaines de ces définitions seront détaillées dans la partie concernant les plans factoriels 1.1.3.

Facteur : un facteur est une variable sur laquelle l'expérimentateur peut agir. Certains facteurs peuvent être qualitatifs, c'est à dire qu'il n'existe pas de relation d'ordre logique pour classer les valeurs qu'ils peuvent prendre. A l'inverse, d'autres facteurs peuvent être quantitatifs. Dans le cas d'un simulateur, les facteurs sont les données d'entrée du code non fixées par le scénario. Si l'on suppose que l'on a s facteurs, on note $X = (X^1, \dots, X^s)$ les s facteurs.

Réponse : il s'agit de la grandeur scalaire à laquelle l'expérimentateur s'intéresse. Dans le cas d'un simulateur, la réponse correspond à la sortie du code. Si on note f la fonction qui

représente le simulateur, la réponse est égale à $f(X)$.

Niveau : un niveau est une valeur que peut prendre un facteur.

Expérience : une expérience correspond à un choix des niveaux des facteurs d'entrée. Dans le cas d'une expérience simulée, une expérience correspond à un jeu de données d'entrée avec lequel on exécute le code. Dans ce chapitre, on note n le nombre d'expériences du plan.

Effet : l'effet d'un facteur ou d'une interaction est le coefficient, dans le modèle linéaire, de la fonction de régression associée au facteur ou à l'interaction correspondant. Dans le cas d'un facteur on parle d'effet principal, dans le cas d'une interaction on parle d'effet d'interaction.

Interaction : deux facteurs X^i et X^j interagissent si l'effet du facteur X^i sur la réponse dépend du niveau du facteur X^j , et inversement. L'interaction entre le facteur X^i et le facteur X^j est la fonction de régression modélisant ce phénomène.

Les expériences simulées présentent certaines particularités. Notamment, lorsque le code est déterministe. En effet, dans ce cas, pour une même entrée, la sortie sera toujours la même. La répétition d'une expérience n'apporte donc aucune information supplémentaire contrairement au cas d'une expérience réelle. Le choix du plan d'expériences dépend également de l'information que l'on souhaite obtenir. En effet, un grand nombre de plans permettent d'étudier uniquement l'influence de chacune des variables, prises individuellement, sur la réponse. Or il se peut que certaines variables interagissent, c'est à dire que l'influence d'une variable sur la réponse dépende de la valeur d'autres variables, et que les effets correspondants soient significatifs. C'est la raison pour laquelle nous choisissons des plans permettant d'étudier également les effets d'interaction. Les sections suivantes sont consacrées à la présentation d'une catégorie de plans d'expériences utilisés pour le criblage permettant d'étudier les interactions et adaptés au cas d'un code numérique. Pour plus de détails sur les plans d'expériences, le lecteur pourra se référer entre autre à [DFS02], [Gou03], [SCS00], [Mon05], ou encore [Kle08].

1.1.3 Les plans factoriels

1.1.3.1 Les plans factoriels complets

Pour analyser l'importance des différents facteurs, nous allons étudier le comportement de la réponse en faisant varier tous les facteurs en même temps. Plus précisément, le nombre de niveaux $nbNiv_j$ que peut prendre chacun des facteurs X^j est fixé. Un plan d'expériences factoriel complet (FC) correspond à l'ensemble des expériences qu'il est alors possible d'effectuer. La figure 1.1 en donne une illustration avec 2 facteurs ayant 3 et 4 niveaux respectivement. Si on considère un plan FC avec c_1 facteurs à a_1 niveaux, c_2 facteurs à a_2 niveaux, ... le

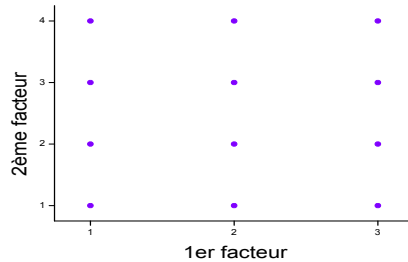


Figure 1.1 – Représentation schématique d'un plan factoriel complet pour 2 facteurs à 3 et 4 niveaux respectivement

plan est alors dit plan FC $a_1^{c_1} a_2^{c_2} \dots$. Lorsque tous les facteurs ont le même nombre de niveaux, le plan est dit symétrique sinon, il est dit asymétrique. Pour simplifier, on ne considère dans ce paragraphe que les plans factoriels symétriques à 2 niveaux, c'est à dire $nbNiv_i = 2$, $\forall i = 1, \dots, s$. On parle dans ce cas d'un niveau haut et d'un niveau bas. Chaque facteur ne pourra alors prendre que 2 valeurs. Il est courant d'utiliser la notation $+1$ et -1 pour désigner ces valeurs, c'est celle que nous adopterons dans ce mémoire, mais on trouve aussi parfois la notation 0 et 1. Un plan d'expériences factoriel complet à 2 niveaux correspond à l'ensemble des expériences qu'il est possible d'effectuer avec 2 niveaux par facteur. On a donc au total 2^s expériences possibles. Lorsqu'on utilise les valeurs $+1$ et -1 pour noter les niveaux des facteurs, une interaction est modélisée par le produit des valeurs des facteurs de l'interaction correspondante.

Définition 1.1.

L'**interaction** entre les facteurs X^{j_1}, \dots, X^{j_d} , $d \leq s$, est la fonction *inter* définie pour $X \in \{-1; 1\}^s$ et à valeur dans $\{-1; 1\}$ par

$$\text{inter}_{j_1, \dots, j_d}(X) = \prod_{l=1}^d X^{j_l}$$

Cette dernière définition n'est valable que pour la notation $+1, -1$. A titre d'exemple, dans le cas de la notation $0, 1$, une interaction est modélisée par la somme modulo 2. Le plan factoriel complet nous permet ainsi d'estimer les effets des facteurs et de leurs interactions à partir du modèle linéaire (1.1) où les fonctions de régression sont pour chaque facteur la fonction coordonnée correspondante ($g_j(X) = X^j$) et pour chaque interaction la fonction produit correspondante ($g_{jl}(X) = X^j X^l$, $g_{jlm}(X) = X^j X^l X^m, \dots$). On ajoute la fonction constante unité pour obtenir la moyenne des observations ($g_\emptyset(X) = 1$). Pour simplifier l'écriture, pour tout sous-ensemble d'indices $u \subseteq \{1, \dots, s\}$, lorsque u contient plus d'un élément on note X^u l'interaction entre les variables indicées dans u et lorsque u ne contient qu'un élément, X^u représente la variable indicée dans u . Par convention, $X^\emptyset \equiv 1$. On peut également définir l'ordre (ou la longueur) d'une interaction comme étant le nombre de variables participant à l'interaction.

Définition 1.2.

L'**ordre** d'une interaction X^u , est le cardinal du sous-ensemble u .

On suppose que la réponse Y est une fonction de $\{-1; 1\}^s$ dans \mathbb{R} qui se décompose selon le modèle suivant :

$$Y = \sum_{u \subseteq \{1, \dots, s\}} \beta_u X^u + \varepsilon \quad (1.3)$$

où ε est une variable aléatoire centrée de variance σ^2 . Nous rappelons que Y n'est qu'une représentation, définie sur $\{-1; 1\}^s$, de la fonction f , qui elle, est définie sur un ensemble $A \subseteq \mathbb{R}^s$. Cette décomposition nous permet de définir plus précisément la notion d'effet.

Définition 1.3.

|| Pour tout sous-ensemble d'indices $u \subseteq \{1, \dots, s\}$, l'**effet** de l'interaction X^u est le coefficient de régression β_u associé à la fonction de régression X^u dans le modèle (1.3).

Définition 1.4.

|| Les **effets principaux** sont les coefficients de régression β_u , associés aux fonctions de régression X^u tels que $|u| = 1$.

A première vue, le modèle (1.3) peut paraître simpliste. Toutefois, nous n'utilisons ce modèle que dans le but d'estimer l'importance des différentes variables en entrée du code CRIRA. Aux points du plan d'expériences, l'écriture matricielle de (1.3), donnée par (1.2), dépend de la matrice M qui contient en première colonne une colonne de 1, puis s colonnes correspondants aux valeurs des s facteurs et enfin $2^s - s - 1$ colonnes contenant les valeurs prises par les interactions. Le calcul de l'estimateur des moindres carrés de β est donné par :

$$\hat{\beta} = ({}^tMM)^{-1} {}^tM\vec{y} \quad (1.4)$$

où tM est la transposée de M . Par construction, le produit tMM est inversible, car les colonnes de M sont linéairement indépendantes. Enfin, notons que dans le cas des plans factoriels complets à 2 niveaux, les colonnes de M sont orthogonales et on a alors :

$$({}^tMM)^{-1} = \frac{1}{n} I_k$$

où I_k est la matrice identité et $k = 2^s$.

L'estimateur des moindres carrés de β s'écrit alors

$$\hat{\beta} = \frac{1}{n} {}^tM\vec{y}. \quad (1.5)$$

Calculer l'estimateur des moindres carrés $\hat{\beta}$ lorsque les colonnes de M sont orthogonales (1.5) revient à résoudre le système d'équations donné par (1.2) où l'on suppose que les résidus sont nuls aux points du plan d'expériences. Dans le cas des plans factoriels complets à 2 niveaux, le système d'équations a 2^s inconnues et 2^s équations. On peut donc estimer les

effets de tous les facteurs et interactions du modèle. Cependant, cela signifie que l'on effectue autant d'expériences que l'on a de coefficients à estimer. La variance de l'estimateur sera alors élevée. Pour obtenir une variance plus faible, il est nécessaire de ne considérer qu'un nombre restreint $k \leq 2^s - 1$ de coefficients. On obtient alors le modèle de régression tronqué :

$$Y = \sum_{i=1}^k \beta_{u_i} X^{u_i} + \varepsilon \quad (1.6)$$

où ε est une variable aléatoire centrée de variance σ^2 et $u_i \subseteq \{1, \dots, s\}$, pour $i = 1, \dots, k$.

Afin d'étudier la significativité des différents facteurs et de leurs interactions, on utilise les tests statistiques. Avant de déterminer l'importance de chaque facteur et interaction, il est nécessaire de savoir si globalement, ils influencent la réponse. En d'autres termes, on veut savoir si tous les effets peuvent être considérés comme négligeables. Pour cela, on teste l'hypothèse de nullité des effets :

$$H_0 : \beta_u = 0, \forall u \subseteq \{1, \dots, s\}$$

contre l'hypothèse alternative :

$$H_1 : \exists u \subseteq \{1, \dots, s\} \text{ tel que } \beta_u \neq 0.$$

Afin de pouvoir utiliser un test de Fisher, il est nécessaire de supposer la gaussianité des résidus du modèle (1.2). Plus exactement, on suppose que chaque ε_i , $i = 1, \dots, n$ du modèle (1.1) suit une loi normale. Le test de Fisher s'effectue grâce à la statistique du même nom, notée F , qui dépend de la variance résiduelle SSR (pour Sum Square Residual), c'est-à-dire de la différence entre la variance des observations et la variance du modèle. Plus précisément, F correspond à l'erreur relative entre la variance résiduelle SSR, sous l'hypothèse de nullité des effets et la variance résiduelle SSR, sous l'hypothèse alternative :

$$F = \frac{n - k}{r} \frac{\text{SSR}(H_0) - \text{SSR}(H_1)}{\text{SSR}(H_1)}$$

où pour $\mathbf{1} = {}^t(1, \dots, 1)$

- Sous l’hypothèse H_0 , on a $M\hat{\beta} = \hat{\beta}_0\mathbf{1} = \bar{y}\mathbf{1}$. Donc $SSR(H_0) = {}^t(\vec{y} - \bar{y}\mathbf{1}).(\vec{y} - \bar{y}\mathbf{1})$.
- Sous l’hypothèse H_1 , on a $SSR(H_1) = {}^t(\vec{y} - M\hat{\beta}).(\vec{y} - M\hat{\beta})$.
- k est le nombre de coefficients du modèle (1.6).
- r est le nombre de coefficients dont on teste la nullité, à savoir $r = k - 1$.

Sous l’hypothèse de gaussianité des résidus, la statistique F suit une loi de Fisher à k et $n - k$ degrés de liberté. Si les facteurs et interactions du modèle influencent la réponse, alors la différence entre les deux variances résiduelles $SSR(H_0)$ et $SSR(H_1)$, sera importante. On considère donc que les facteurs et interactions du modèle influencent globalement la réponse lorsque F est supérieure au quantile de seuil *seuil*, de la loi de Fisher à k et $n - k$ degrés de liberté. Le seuil du quantile est l’erreur de première espèce, à savoir la probabilité de rejeter l’hypothèse de nullité des effets alors qu’elle est vraie. Les valeurs couramment utilisées varient entre 0,1% et 20%. Le recours à un logiciel pour effectuer le test de Fisher est très fréquent. Cependant, la plupart des logiciels n’effectuent pas la comparaison avec le quantile de la loi de Fisher. Au lieu de cela, on dispose de la significativité du test, (à ne pas confondre avec la significativité des variables) appelée aussi p-value. La p-value est la valeur critique de seuil du quantile de la loi de Fisher qui fait basculer le résultat du test. En d’autres termes, si le seuil choisi est supérieur à la p-value, on rejette l’hypothèse H_0 , dans le cas contraire on ne rejette pas H_0 . Notons que supposer les résidus gaussiens, revient à supposer que chaque y_i du modèle (1.1) suit une loi normale. Si les facteurs et interactions du modèle influencent la réponse, alors il est possible de tester l’influence de chacun des facteurs et de chacune des interactions individuellement. Plus précisément, on teste l’hypothèse de nullité de l’effet de X^{u_i} pour chaque u_i , $i = 1, \dots, k$:

$$H_0^{u_i} : \beta_{u_i} = 0$$

contre l’hypothèse alternative :

$$H_1^{u_i} : \beta_{u_i} \neq 0 .$$

Comme dans le cas du test global, il est nécessaire de supposer la gaussianité des résidus du modèle (1.2) afin de pouvoir utiliser un test de Fisher. Pour chaque facteur et interaction, la statistique de Fisher est l’erreur relative entre la variance résiduelle SSR , sous l’hypothèse de nullité de l’effet β_{u_i} et la variance résiduelle SSR , sous l’hypothèse alternative :

- Sous l’hypothèse H_0 , $\beta_{u_i} = 0$. Posons β^{-i} le vecteur égal à β mais pour lequel la $i^{\text{ème}}$ valeur est remplacée par 0. On a alors $\text{SSR}(H_0) = {}^t(\vec{y} - M\hat{\beta}^{-i}).(\vec{y} - M\hat{\beta}^{-i})$.
- Sous l’hypothèse H_1 , $\text{SSR}(H_1) = {}^t(\vec{y} - M\hat{\beta}).(\vec{y} - M\hat{\beta})$.
- k est le nombre de coefficients du modèle (1.6).
- r est le nombre de coefficients dont on test la nullité, à savoir $r = 1$.

Comme dans le cas du test global, on considère qu’un facteur ou une interaction influence la réponse lorsque la statistique de Fisher correspondante est supérieure au quantile de seuil fixé, de la loi de Fisher à 1 et $n - k$ degré de liberté ou lorsque la p-value est inférieure à ce même seuil.

Lorsque le nombre s de facteurs est grand, le nombre d’expériences d’un plan factoriel complet devient irréalisable. Pour réduire le nombre d’expériences, on ne conserve qu’une fraction du plan complet, appelée un plan factoriel fractionnaire.

1.1.3.2 Les plans factoriels fractionnaires

La base théorique des plans factoriels fractionnaires (FF) a été publiée par Finney en 1945 [Fin45] (voir [AB06], [Gou03], [DFS02], [Kle08], [Mon05] pour une vue d’ensemble sur les plans d’expériences). Un plan d’expériences factoriel fractionnaire correspond à une fraction d’un plan factoriel complet. On peut n’effectuer qu’un demi, un quart ou plus généralement $1/(2^{p_2})$ des expériences du plan complet, avec $p_2 < s$. Le plan ainsi obtenu est dit plan factoriel fractionnaire 2^{s-p_2} . Une méthode classique de construction d’un plan factoriel fractionnaire 2^{s-p_2} consiste à sélectionner $p_1 = s - p_2$ facteurs parmi les s , appelés facteurs de base, pour lesquels on effectue un plan factoriel complet à 2^{p_1} expériences. Les autres facteurs, appelés facteurs définis, sont obtenus à partir des facteurs de base par multiplication. Plus précisément, chaque facteur défini est construit de manière à ce qu’il s’identifie avec une interaction des p_1 facteurs de base. On peut noter que, de cette manière, les colonnes de la matrice M sont soit égales soit orthogonales (au sens du produit scalaire usuel sur \mathbb{R}^n). Nous illustrons la méthode de construction des plans factoriels fractionnaires dans l’exemple suivant.

Exemple 1.1.

Supposons que l'on souhaite construire un plan factoriel à $s = 4$ facteurs à 2 niveaux avec uniquement $n = 8 = 2^3 = 2^{4-1}$ expériences. On sélectionne $s - p_2 = 3$ facteurs de base parmi les $s = 4$, par exemple X^1 , X^2 et X^3 . On construit le plan complet complet correspondant. On identifie le facteur défini X^4 à l'interaction $X^{1;2}$. Le plan factoriel fractionnaire 2^{4-1} obtenu est le suivant :

	X^1	X^2	X^3	$X^4 = X^{1;2}$	$X^{1;3}$	$X^{2;3}$	$X^{1;2;3}$
exp 1	1	1	1	1	1	1	1
exp 2	1	1	-1	1	-1	-1	-1
exp 3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
exp 4	1	-1	-1	-1	-1	1	1
exp 5	-1	1	1	-1	-1	1	-1
exp 6	-1	1	-1	-1	1	-1	1
exp 7	-1	-1	1	1	-1	-1	1
exp 8	-1	-1	-1	1	1	1	-1

Comme dans le cas des plans factoriels complets, il est possible d'inclure des interactions dans le modèle. Pour que tMM soit encore inversible, il suffit que ses colonnes soient toutes distinctes. Cela revient à identifier des interactions des s facteurs à des interactions des p_1 facteurs de base. Dans l'exemple 1.1, l'interaction $X^{3;4}$ s'identifie à l'interaction $X^{1;2;3}$. On peut remarquer que de cette manière, la matrice M est identique à la matrice d'un plan factoriel complet 2^{p_1} . Concrètement, cela signifie qu'avec $n = 2^{s-p_2}$ expériences, on ne peut estimer au plus que $k = n$ effets. On choisit donc *a priori* au plus $k = 2^{s-p_2}$ facteurs et interactions X^{u_j} , $j = 1, \dots, k$ tels que :

$$Y = \sum_{j=1}^k \beta_{u_j} X^{u_j} + \varepsilon \quad (1.7)$$

et tels que tMM soit inversible. Pour choisir ces k facteurs et interactions, il est d'usage de supposer que les interactions d'ordre élevé ont un effet négligeable. On ne conserve alors que l'interaction d'ordre le plus faible. En reprenant l'exemple 1.1, on privilégie dans le modèle

l'interaction $X^{3;4}$ au détriment de l'interaction $X^{1;2;3}$. On a donc à nouveau l'estimateur $\hat{\beta}$ donné par (1.5). Cependant, il est à noter que dans ce cas, pour $1 \leq j \leq n$, $\hat{\beta}_{u_j}$ ne correspond plus à l'effet de X^{u_j} , mais à l'effet de la somme des facteurs et interactions, dont la succession des valeurs des niveaux pour les n expériences est identique. On dit dans ce cas que ces facteurs et interactions sont aliasés et que leurs effets sont confondus. Ce qui signifie, pour l'exemple 1.1, que l'effet $\hat{\beta}_{3;4}$ correspond à l'effet de $X^{3;4} + X^{1;2;3}$ et que $X^{3;4}$ est aliasé à $X^{1;2;3}$. Les facteurs et interactions qui sont aliasées sont alors appelées des alias. Pour estimer les effets des interactions d'ordre l , $l < s$, il est préférable que ces interactions ne soient aliasées à aucune autre interaction, ou bien qu'elles soient aliasées à des interactions dont les effets peuvent être supposés négligeables. On définit alors la résolution du plan factoriel fractionnaire :

Définition 1.5.

La résolution d'un plan factoriel fractionnaire, notée en chiffres romains, est l'ordre de la plus petite interaction aliasée avec 1.

Dans l'exemple précédent, on a $X^{1;2} = X^4$, donc $X^{1;2;4} = 1$. $X^{1;2;4}$ est l'interaction la plus courte aliasée avec 1. La résolution du plan 2^{4-1} de l'exemple 1.1 est donc de *III*. Plus la résolution du plan est grande et moins il y a d'effets confondus. Ainsi, la résolution d'un plan factoriel fractionnaire doit être suffisamment grande pour limiter les confusions d'effets. De la même manière que dans le cas des plans factoriels complets, on étudie l'importance des facteurs et interactions du modèle à l'aide d'un test de Fisher.

1.1.4 Les hypothèses d'applications

Nous avons constaté que pour mettre en place un test de Fisher, il était nécessaire de supposer la normalité des résidus pour analyser l'importance des facteurs et des interactions et déterminer les variables les plus influentes. Or, le code étant déterministe, il n'y a pas d'aléas sur la sortie. Pour la même raison, les résidus ne sont pas aléatoires. On ne peut donc pas appliquer directement le raisonnement classique présenté ci-dessus. Ce problème peut être contourné. En effet, lorsque la dimension est suffisamment grande, il est possible

de prendre un modèle ne contenant que $d < s$ variables et de tester l'adéquation du modèle en supposant que les variations dues aux variables omises constituent un bruit aléatoire [ASS97]. Ceci revient à considérer le modèle (1.7) pour lequel les résidus sont constitués de facteurs et d'interactions non influents. Lorsque le nombre de facteurs et d'interactions non influents est très grand par rapport au nombre de facteurs et d'interactions importants il est d'usage de considérer que le TCL s'applique et donc on considère que les résidus sont des variables aléatoires gaussiennes. Cependant, supposer les résidus gaussiens revient à supposer que la réponse est gaussienne. Or une étude [Lef06] a montré que la distribution de la SIR ne peut pas être considérée comme gaussienne. De plus, le but de l'étude est de déterminer quels sont les facteurs importants pour la réponse. Ce qui signifie qu'avant de commencer l'étude, on suppose qu'il existe un certain nombre de facteurs non négligeables que l'on cherche à déterminer. Les interactions dépendant de ces facteurs peuvent également ne pas être négligeables. Ainsi, soit on place des variables, et les interactions qui en dépendent, de manière arbitraire dans les résidus, on prend alors le risque de compter dans les résidus des facteurs et des interactions importants dont la somme n'est pas nécessairement gaussienne. Soit on ne considère dans les résidus qu'une petite partie des facteurs et des interactions dont on est sûr qu'ils ne sont pas importants. Mais le nombre de facteurs et interactions considérés dans les résidus n'est alors pas très grand par rapport au nombre de facteurs et interactions importants. Dans ce cas, la validité des hypothèses d'application du théorème central limite n'est pas garantie. En résumé, appliquer le TCL revient à supposer que le problème est déjà résolu.

Il existe une autre méthode permettant d'évaluer l'importance des variables qui ne nécessite pas de supposer les résidus gaussiens. Il s'agit de l'analyse de variance fonctionnelle.

1.2 L'analyse de variance fonctionnelle

Dans la section précédente, nous avons supposé que l'on observait une variable aléatoire Y correspondant à la réalisation d'une fonction f en des points considérés comme déterministes. Dans le cas de l'analyse de variance fonctionnelle, on suppose que l'on observe la variable aléatoire qui correspond à la réalisation d'une fonction mesurable f en un point

s -dimensionnel (X^1, \dots, X^s) , où X^1, \dots, X^s sont considérées comme des variables aléatoires indépendantes. On suppose de plus que $E(f^2(X)) < \infty$. Contrairement à l'approche par plan d'expériences qui ne fait aucune hypothèse sur le domaine de définition de la fonction f , l'analyse de variance fonctionnelle suppose que f est définie sur $[0, 1]^s$. Un simple changement de variable permet toujours de se ramener à ce cas. L'analyse de variance fonctionnelle consiste à décomposer la fonction f en une somme de fonctions $\alpha_u(X)$ indicées par des sous-ensembles $u \subseteq \{1, \dots, s\}$ de manière à ce que chaque fonction $\alpha_u(X)$ ne dépende que des variables indicées dans u . L'importance des variables est ensuite quantifiée à l'aide de la proportion de variance expliquée par chaque fonction $\alpha_u(X)$. La décomposition est donnée par le lemme suivant :

Lemme 1.1 ([Hoe48], [ES81]).

$$f(X^1, \dots, X^s) = \sum_{u \subseteq \{1, \dots, s\}} \alpha_u((X^j)_{j \in u}) \quad (1.8)$$

où les $2^s - 1$ fonctions $\alpha_u((X^j)_{j \in u})$ définies par

$$\alpha_u((X^j)_{j \in u}) = E(f(X) \mid \{X^j, j \in u\}) - \sum_{v \subsetneq u} \alpha_v((X^j)_{j \in v}), \quad (1.9)$$

sont de moyenne nulle et mutuellement décorréélées :

$$\alpha_\emptyset = E(f(X))$$

$$E(\alpha_u((X^j)_{j \in u})) = 0, \quad \forall u \subseteq \{1, \dots, s\}$$

$$\text{cov}(\alpha_u((X^j)_{j \in u}), \alpha_v((X^j)_{j \in v})) = 0 \quad \forall u, v \in \{1, \dots, s\} \quad u \neq v. \quad (1.10)$$

Pour la preuve voir [ES81]. Par définition (1.9), chaque fonction $\alpha_u((X^j)_{j \in u})$ ne dépend que des variables indicées dans u et représente l'effet du facteur ou de l'interaction indicé dans u duquel on a soustrait les contributions des facteurs et interactions indicés dans les sous-ensembles inclus strictement dans u .

L'annulation des covariances (1.10) et la décomposition (1.8), permettent de décomposer la variance totale en la somme des variances :

$$\text{Var}(f(X)) = \sum_{u \subseteq \{1, \dots, s\}} \text{Var}(\alpha_u((X^j)_{j \in u})).$$

En divisant chaque variance par la variance totale, on obtient les indices de Sobol de chaque sous-ensemble de variables :

$$IS_u = \frac{\text{Var}(\alpha_u((X^j)_{j \in u}))}{\text{Var}(f(X))}. \quad (1.11)$$

L'indice de Sobol, IS_u , représente la proportion de variance expliquée par les variables indicées dans le sous-ensemble u sans les contributions des variables indicées dans les sous-ensembles inclus dans u . De plus, contrairement à l'approche par plan d'expériences, les indices de Sobol ne dépendent pas de la forme a priori du modèle.

Comme nous l'avons évoqué dans l'introduction, en grande dimension, la vitesse de convergence théorique de la méthode d'intégration numérique Monte Carlo devrait être meilleure que celle de la méthode quasi-Monte Carlo. Or, en pratique, il a été observé que même en grande dimension, la méthode QMC pouvait donner de bons résultats [PT95], [NT96], [CMO97], [ABG98], [L'E04] et [IT06]. Une explication avancée par Caffisch, Morokoff et Owen [CMO97] serait que la fonction f dépend en réalité d'un nombre de variables d très inférieur à la dimension initiale s . Ainsi, Caffisch, Morokoff et Owen [CMO97] définissent la dimension effective au sens de la troncature et au sens de la superposition à l'aide des indices de Sobol :

Définition 1.6.

La **dimension effective au sens de la troncature** est le plus petit entier d_t tel que

$$\sum_{u \subseteq \{1, \dots, d_t\}} \text{Var}(\alpha_u((X_j)_{j \in u})) \geq 0.99 \text{Var}(f(X))$$

Définition 1.7.

La **dimension effective au sens de la superposition** est le plus petit entier d_s tel que

$$\sum_{0 < |u| < d_s} \text{Var}(\alpha_u((X_j)_{j \in u})) \geq 0.99 \text{Var}(f(X))$$

Si on ordonne les variables par ordre d'importance, la dimension effective au sens de la troncature correspond au nombre minimal de variables pour lesquelles toutes les interactions expliquent 99% de la variance totale. La dimension effective au sens de la superposition correspond à l'ordre minimal des interactions à prendre en compte pour expliquer 99% de la variance totale. Dans les définitions 1.6 et 1.6, le pourcentage de variance expliquée est fixé arbitrairement à 99%. Une généralisation de ces deux définitions est possible en considérant le pourcentage de variance expliquée comme un paramètre de la définition [Owe98a].

Par ailleurs, Liu et Owen [LO06] proposent de considérer la dimension comme une variable aléatoire et de calculer son espérance. Plus précisément, soit U un sous-ensemble de $\{1, \dots, s\}$ tiré aléatoirement avec la probabilité $P(U = u) = IS_u$. L'espérance de la dimension est donnée par

$$E(|U|) = \frac{1}{\text{Var}(f(X))} \sum_{j=1}^s \sum_{\substack{v \subseteq \{1, \dots, s\} \\ v \ni j}} \text{Var}(\alpha_v((X^l)_{l \in v})) \quad (1.12)$$

La difficulté de la méthode d'analyse de variance fonctionnelle, et en particulier le calcul de la dimension effective, réside dans l'estimation des indices de Sobol. Nous présentons deux des principales méthodes pour les estimer : la méthode de Sobol [Sob90] et [Sob95], et la méthode FAST [CFS⁺73], [CSS75], [CLS78] et [SS73].

La méthode de Sobol consiste à estimer chaque indice à l'aide d'une méthode de type Monte Carlo. Plus exactement, chaque variance est estimée par une méthode Monte Carlo. En comptant l'estimation de la variance totale, la méthode de Sobol nécessite 2^s calculs d'intégrales par Monte Carlo pour une caractérisation complète du système, ce qui est inatteignable, à moins que la dimension s soit petite. Dans le cas de la SIR, la dimension étant

au minimum de $s = 20$, il serait alors nécessaire d'effectuer environ 10^6 calculs d'intégrale. Une alternative consiste à calculer uniquement les indices de Sobol d'ordre 1 (c'est-à-dire de chaque variable) et les indices que l'on appelle indices totaux pour chaque variable. Les indices de Sobol totaux sont définis pour chaque variable X^l , $l = 1, \dots, s$, de la manière suivante :

$$IS_l^{total} = \frac{\sum_{\substack{u \subseteq \{1, \dots, s\} \\ u \ni l}} \text{Var}(\alpha_u((X^j)_{j \in u}))}{\text{Var}(f(X))}. \quad (1.13)$$

Le nombre d'intégrales à estimer pour le calcul de tous les indices totaux est $s + 1$. Notons qu'à l'aide des indices de Sobol totaux, l'estimation de la dimension moyenne (1.12) ne nécessite le calcul que de $s + 1$ intégrales. Cependant, même en ne calculant que les indices totaux, ou que les indices d'ordre 1, cela revient à un problème d'estimation de $s + 1$ intégrales, ce qui est plus compliqué que le problème initial. De plus, les indices d'ordre 1, seuls, n'informent pas sur d'éventuelles interactions et les indices totaux, seuls, ne permettent pas de faire la différence entre une variable importante en raison de ses interactions et une variable importante en raison de son effet principal. Dans ce cas, on est amené à calculer les indices d'ordre 1 ainsi que les indices totaux, ce qui revient à calculer $2s + 1$ intégrales.

La méthode FAST classique [CFS⁺73], [CSS75], [CLS78] permet d'estimer les indices du premier ordre (c'est-à-dire de chaque variable). Elle repose sur la décomposition de la variance dans le domaine spectral. La méthode FAST convertit l'intégrale s -dimensionnelle en une intégrale uni-dimensionnelle par rapport à θ en utilisant les fonctions de transformation G_j pour $j = 1, \dots, s$:

$$X^j = G_j(\sin(\omega_j \theta))$$

où $\theta \in]-\pi; \pi[$ est une variable scalaire et $(\omega_j)_{j=1, \dots, s}$ est un ensemble de fréquences angulaires entières. Pour G_j et ω_j choisis, on a

$$E(f(X)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) d\theta$$

où $f(\theta) = f(G_1(\sin(\omega_1\theta)), \dots, G_s(\sin(\omega_s\theta)))$. La variance totale est donnée par

$$\text{Var}(Y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^2(\theta) d\theta - E^2(f(X)).$$

On estime la variance totale et la part de variance due à une variable X^j à l'aide d'une décomposition en série de Fourier. En particulier, la part de variance expliquée par X^j est estimée par la somme des carrés des coefficients de Fourier attribués à la fréquence ω_j et à ses harmoniques. Les coefficients de Fourier sont, quant à eux, estimés à l'aide d'une méthode Monte Carlo classique. Le principal avantage de cette méthode est qu'elle permet de déterminer tous les indices du premier ordre en un seul jeu de n simulations. Saltelli et al. [STC99] déterminent une taille d'échantillon minimale pour l'évaluation de ces indices :

$$n_{min} = 2H \max(\omega_1, \dots, \omega_s) + 1$$

où H est l'ordre maximal des harmoniques considérées. Quand H est grand l'indice calculé par la méthode FAST reflète bien l'effet de la variable. Toutefois, l'augmentation de H augmente le nombre de simulations. Cukier et al. [CSS75] ont déterminé de façon empirique que le meilleur compromis pour H se situe à $H = 4$ ou $H = 6$, quelle que soit la dimension s du problème. Les fréquences ω_i doivent être linéairement indépendantes pour éviter les interférences. Dans [CLS78] un algorithme pour la génération des fréquences libres d'interférences jusqu'à un certain ordre H , ($3 < H < 7$), est proposé. Par conséquent, plus la dimension est grande et plus le nombre de simulations à effectuer devient important. Pour ce qui est du choix des transformations G_j , on pourra trouver des suggestions dans [CFS⁺73] et [STC99]. La méthode FAST étendue [STC99], permet de calculer les indices totaux ainsi que les indices du premier ordre. On prend une fréquence élevée pour X^j et une petite fréquence pour toutes les autres. Un algorithme pour automatiser le choix des fréquences a été proposé dans [STC99]. Cette méthode consiste à évaluer la part de variance due à toutes les variables sauf X^j avec la somme des carrés des coefficients de Fourier attribués à toutes les fréquences $\omega_{\sim j}$ autres que ω_j et ses harmoniques. Ainsi le nombre minimal n_{min} d'évaluations de la fonction

pour calculer les indices du premier ordre et les indices totaux est :

$$n_{min} = s(2H \max(\omega_1, \dots, \omega_s) + 1)$$

où la fréquence maximale, sélectionnée par l'algorithme de [STC99], est au moins égale à 8 pour éviter les interférences.

Pour plus de détails sur l'analyse de variance fonctionnelle (FANOVA) le lecteur pourra se reporter à [ES81], [Owe92] ou [SCS00].

Les contraintes de la mise en oeuvre

L'ANOVA fonctionnelle présente l'avantage de ne pas supposer la gaussianité de la réponse. Cependant, avec la méthode de Sobol, le nombre d'évaluations de la fonction f nécessaire à une bonne estimation des indices devient prohibitif dès que la dimension est grande. En effet, le nombre d'indices à calculer est $2^s - 1$. Même si on n'effectue que le calcul des indices des variables et des interactions d'ordre deux, on doit calculer au moins $\frac{s(s+1)}{2}$ indices. L'utilisation de méthodes moins coûteuses en terme d'évaluations de la fonction, telles que la méthode FAST, permettent le calcul des indices du premier ordre ainsi que les indices totaux. Pour la méthode FAST, le nombre d'évaluations de la fonction est au minimum de $65s$. Cependant, quelle que soit la méthode utilisée, il est nécessaire de supposer l'indépendance globale des variables. C'est grâce à cette hypothèse que l'on peut décomposer la variance totale en la somme des variances. Or, dans le cadre du calcul de SIR, plusieurs variables sont corrélées. La température de l'air et l'humidité relative en sont un exemple. En théorie, il est toujours possible de trouver une transformation permettant de se ramener à des variables indépendantes. Cependant, en pratique, trouver la bonne transformation peut s'avérer très difficile, en particulier lorsqu'on ne dispose d'aucune information sur la relation qui les lie. Pour se ramener au cas indépendant, nous aurions pu également envisager de remplacer les 8 variables corrélées par une variable aléatoire uniforme permettant d'effectuer un tirage bootstrap avec remise dans une base de données contenant des réalisations des 8 variables corrélées. Toutefois, parmi les 8 variables corrélées, certaines sont très influentes sur le calcul de SIR et d'autres ne le sont pas du tout. Dans un but purement d'analyse de sensibilité,

cette approche ne permet pas de distinguer les effets des différentes variables corrélées.

1.3 Conclusion

Nous avons abordé dans ce chapitre deux approches pour réduire la dimension : l'approche par plan d'expériences et celle par analyse de variance. Dans le cas des plans d'expériences, le test de Fisher impose de supposer la gaussianité des résidus. Cependant, comme nous en avons discuté, cette hypothèse n'est pas vérifiée dans le cas d'un calcul de SIR. Quant à l'approche par analyse de variance, l'hypothèse d'indépendance globale des variables n'est pas satisfaite dans notre cas. En résumé, les approches usuelles pour déterminer les variables influentes ne sont pas adaptées à un calcul de SIR, soit en raison d'un coût de calcul trop élevé, soit en raison d'hypothèses non vérifiées. Nous détaillerons au chapitre 3 une méthode pour évaluer l'importance des variables nécessitant des hypothèses moins contraignantes et dont le coût, en terme d'évaluations de la fonction, reste raisonnable.

CHAPITRE 2

L'INTÉGRATION NUMÉRIQUE

En l'absence d'information sur la régularité de la fonction, la méthode de Monte Carlo est une méthode d'intégration numérique fréquemment employée [HH64]. Cependant sa vitesse de convergence est en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$, n étant, dans ce chapitre, le nombre de points de la suite utilisée. Plus précisément, la largeur des intervalles de confiance converge en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$. Par conséquent, pour obtenir une bonne précision, il est nécessaire d'effectuer un grand nombre de simulations. L'échantillonnage par hypercube latin permet de diviser la vitesse de convergence d'un facteur constant, mais celle-ci reste en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$. Sous condition de petite dimension s , la méthode quasi-Monte Carlo dispose d'une vitesse de convergence plus rapide en $\mathcal{O}(\frac{(\log n)^s}{n})$. Cette vitesse de convergence dépend explicitement de la dimension, et suggère que, lorsque la dimension s augmente, pour conserver une bonne précision de l'estimateur, le nombre de points n nécessaire croît de manière exponentielle avec la dimension. Ce phénomène bien connu est souvent appelé le fléau de la dimension. En grande dimension avec un nombre de points restreint, le régime asymptotique n'est pas atteint. Dans ce cas, il n'est pas possible de garantir que la méthode QMC permettra d'obtenir de meilleurs résultats que la méthode MC. Cependant, plusieurs résultats numériques en grande dimension ont mis en évidence que la méthode QMC pouvait donner de meilleurs résultats que MC. Ces observations peuvent s'expliquer par la dimension effective de la fonction d'intérêt h qui serait en réalité très inférieure à la dimension initiale s . Notons que, dans ce chapitre, nous envisageons la possibilité que la fonction d'intérêt soit distincte de la fonction représentant le code CRIRA. Plus précisément, nous rappelons que nous souhaitons estimer une probabilité de dépassement de seuil. La fonction d'intérêt correspondante est alors l'indicatrice que la fonction représentant le code CRIRA soit supérieure à un certain seuil. Nous désignerons alors par h la fonction que l'on souhaite intégrer et par f la fonction représentant le programme informatique CRIRA.

La première section de ce chapitre est consacrée à l'étude du principe de la méthode de

Monte Carlo. Nous nous intéresserons plus particulièrement à sa vitesse de convergence. La deuxième section de ce chapitre est consacrée à l'échantillonnage par hypercube latin. En raison de sa vitesse de convergence plus rapide, nous approfondissons la méthode quasi-Monte Carlo dans la troisième section. Plus précisément, nous définissons tout d'abord plusieurs discrédances en tant que mesures de la non uniformité d'une séquence de points. Nous nous intéressons ensuite à l'estimation d'erreur dans le cadre de la méthode quasi-Monte Carlo, qui est étroitement liée à la discrédance. Enfin nous présentons plusieurs suites à discrédances faible que nous utiliserons dans les applications numériques des chapitres suivants.

2.1 La méthode de Monte Carlo

Soit $h : [0, 1]^s \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction intégrable. On suppose que l'on souhaite calculer l'intégrale

$$I = \int_{[0,1]^s} h(t) dt.$$

Le principe de la méthode Monte Carlo est basé sur le fait que si X est une variable aléatoire uniformément distribuée sur l'hypercube unité, alors on a :

$$E(h(X)) = \int_{[0,1]^s} h(t) dt.$$

Le calcul de l'intégrale se ramène donc à un calcul d'espérance. La loi forte des grands nombres assure la convergence presque-sûre de l'estimateur

$$I_n^{MC} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$$

vers l'intégrale I quand n tend vers l'infini, où $x = (x_1, \dots, x_n)$ est un échantillon de vecteurs aléatoires de dimension s , i.i.d. (indépendants et identiquement distribués), tirés de manière uniforme dans $[0, 1]^s$. On note $\mathcal{U}([0, 1]^s)$ la loi uniforme sur $[0, 1]^s$.

L'estimateur I_n^{MC} est un estimateur non biaisé de I . En effet :

$$E(I_n^{MC}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E(h(x_i)) = E(h(X)) = I.$$

En résumé, l'approximation de Monte Carlo est donnée par :

$$\int_{[0,1]^s} h(t) dt \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \quad (2.1)$$

où (x_1, \dots, x_n) sont n réalisations indépendantes d'un vecteur aléatoire de loi $\mathcal{U}([0, 1]^s)$.

Si la variance de la fonction h

$$\text{Var}(h(X)) = \int_{[0,1]^s} (h(t) - E(h(X)))^2 dt$$

est finie, alors la variance de l'estimateur I_n^{MC} est donnée par

$$\text{Var}(I_n^{MC}) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}(h(x_i)) = \frac{\text{Var}(h(X))}{n}. \quad (2.2)$$

En d'autres termes,

$$E((I_n^{MC} - I)^2) = \frac{\text{Var}(h(X))}{n}. \quad (2.3)$$

Le théorème central limite nous permet d'obtenir, pour de grandes valeurs de n , un intervalle de confiance

$$\left[I_n^{MC} - u \frac{\sqrt{\text{Var}(h(X))}}{\sqrt{n}}; I_n^{MC} + u \frac{\sqrt{\text{Var}(h(X))}}{\sqrt{n}} \right]$$

de niveau $1 - \alpha$ où u est le quantile d'une loi normale de niveau $1 - \frac{\alpha}{2}$. Ce qui a rendu la méthode Monte Carlo populaire est le fait que la taille de l'intervalle décroît en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$ indépendamment de la dimension s . De plus, cette méthode ne nécessite pas une grande régularité de la fonction à intégrer.

En pratique, l'utilisation de la méthode Monte Carlo nécessite la génération de nombres aléa-

toires. Le succès de la méthode dépend donc en grande partie du générateur. Les générateurs utilisent des moyens purement déterministes pour simuler le hasard. On parle alors de générateurs de nombres pseudo-aléatoires. Différents générateurs de nombres pseudo-aléatoires sont étudiés dans l'ouvrage [Knu69]. La figure 2.1 illustre une distribution pseudo-aléatoire de 1000 points en dimension 2. Le générateur utilisé pour les tests numériques est celui de base du langage java qui est à congruence linéaire. Ce qui signifie que l'on génère un entier x_{n+1} de la manière suivante

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \pmod{m}$$

où a et c et m sont des entiers $a = 25214903917$, $c = 11$, $m = 2^{47}$ et x_0 est un entier généré à partir de la date système. Pour obtenir un nombre compris entre 0 et 1, on utilise les entiers générés aux étapes $2n$ et $2n + 1$ [L'E01]. Plus précisément, le $n^{\text{ème}}$ point u_n de $[0,1[$ est donné par :

$$u_n = (2^{27} \lfloor x_{2n}/2^{22} \rfloor + \lfloor x_{2n+1}/2^{21} \rfloor) / 2^{53}$$

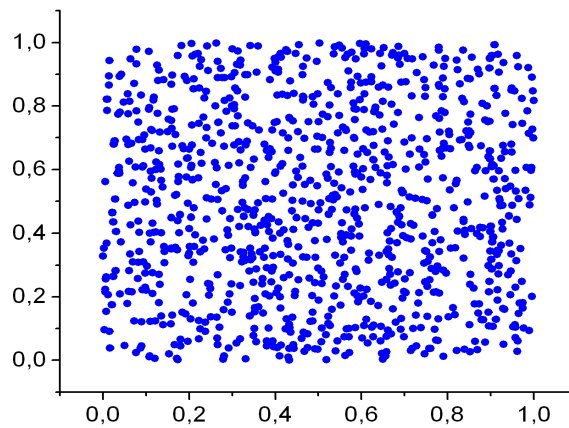


Figure 2.1 – 1000 points générés à l'aide d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires à congruence linéaire

Discussion

Bien que les points soient générés de manière déterministe, l'estimation de l'intégrale I par I_n^{MC} se justifie [Zar68] par le fait que pour toute fonction h intégrable au sens de Riemann, il suffit que la séquence (x_1, \dots, x_n) soit équirépartie pour garantir la convergence

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) = \int_{[0,1]^s} h(t) dt.$$

De plus l'estimation de l'erreur (2.3) est indépendante de la dimension (même si en réalité, la dimension peut intervenir au travers du terme $\text{Var}(h(X))$). Cependant la taille de l'intervalle de confiance décroît en $\mathcal{O}(1/\sqrt{n})$. Ce qui signifie que pour obtenir une bonne précision sur la valeur de l'intégrale I , le nombre d'expériences à effectuer devient en général irréaliste pour des fonctions coûteuses à évaluer.

Pour améliorer les performances de la méthode Monte Carlo, il est courant d'utiliser des méthodes dites de réduction de variance [DR84] qui consistent à réduire la variance (2.2) d'un facteur constant. On peut citer, entre autre, la méthode des variables de contrôle, la méthode des variables antithétiques, la méthode d'échantillonnage stratifié ou encore la méthode d'échantillonnage préférentiel. En particulier, l'échantillonnage par hypercube latin est une forme d'échantillonnage stratifié.

Sauf exceptions [AG07], [LP94] et [L'E09], ces méthodes réduisent la variance d'un facteur constant, elle ne changent pas la vitesse de convergence en $\mathcal{O}(1/\sqrt{n})$, c'est la raison pour laquelle nous n'utiliserons pas ces méthodes. Cependant, l'échantillonnage par hypercube latin est souvent utilisé comme base pour construire des suites finies de points dans le cadre d'algorithmes d'échanges comme nous le verrons dans la section 2.3.5.

2.2 Échantillonnage par hypercube latin

L'échantillonnage stratifié, dont le but est de réduire la variance, consiste à découper l'espace des variables d'entrée $[0, 1]^s$, en sous-espaces disjoints, puis à échantillonner au sein de chacun de ces sous-espaces. L'échantillonnage par hypercube latin (LHS) est un cas par-

ticulier d'échantillonnage stratifié où on s'assure que le découpage a défini des sous-espaces équiprobables, et que chaque sous-espace est échantillonné de manière uniforme. Plus précisément, chaque intervalle de chacune des variables est partitionné en n sous-intervalles de même probabilité $[\frac{i-1}{n}; \frac{i}{n}]$, $i = 1, \dots, n$. Une valeur est sélectionnée de manière uniforme dans chaque sous-intervalle. Les n valeurs obtenues pour la variable X^1 sont couplées aux n valeurs de la variable X^2 de manière aléatoire et équiprobable pour chaque combinaison. Plus précisément, on se donne deux permutations aléatoires uniformes indépendantes π_1 et π_2 de $\{1, \dots, n\}$. La valeur de X^1 sur le sous-intervalle $[\frac{\pi_1(i-1)}{n}; \frac{\pi_1(i)}{n}]$ sera couplée à la valeur de X^2 sur le sous-intervalle $[\frac{\pi_2(i-1)}{n}; \frac{\pi_2(i)}{n}]$. Ces n paires sont ensuite combinées de manière aléatoire et équiprobable avec les n valeurs de la variable X^3 pour former n triplets, et ainsi de suite jusqu'à ce que n s -uplets soient formés. On peut donc générer un LHS de n points en dimension s , en prenant s permutations aléatoires uniformes indépendantes de $\{1, \dots, n\}$, $\pi_j(1), \dots, \pi_j(n)$, $j = 1, \dots, s$. Les s coordonnées des n points sont alors données par :

$$x_i^j = \frac{\pi_j(i) - U_i^j}{n} \quad j = 1, \dots, s, \quad i = 1, \dots, n$$

où $(U_i^j)_{i=1, \dots, n, j=1, \dots, s}$ sont ns variables aléatoires i.i.d de loi $\mathcal{U}([0, 1]^s)$. La figure 2.2 illustre un échantillonnage par hypercube latin en dimension $s = 2$. Sur cette figure, on voit que l'intervalle de chaque variable a été découpé en $n = 10$ sous-intervalles de même taille. Pour chaque variable et dans chaque sous-intervalle un point a été généré selon une loi uniforme. Les couples (X^1, X^2) ont été obtenus à l'aide des permutations $\pi_1 = (5; 4; 7; 9; 8; 2; 10; 3; 1; 6)$ et $\pi_2 = (9; 4; 5; 7; 10; 6; 8; 1; 2; 3)$.

L'estimateur de l'intégrale I est donné par la même formule que l'estimateur Monte Carlo

$$I_n^{LHS} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$$

où pour $i = 1, \dots, n$, x_i est issu d'un échantillonnage par hypercube latin.

On peut prouver [MBC79] que lorsque la fonction h est monotone en chacune de ses

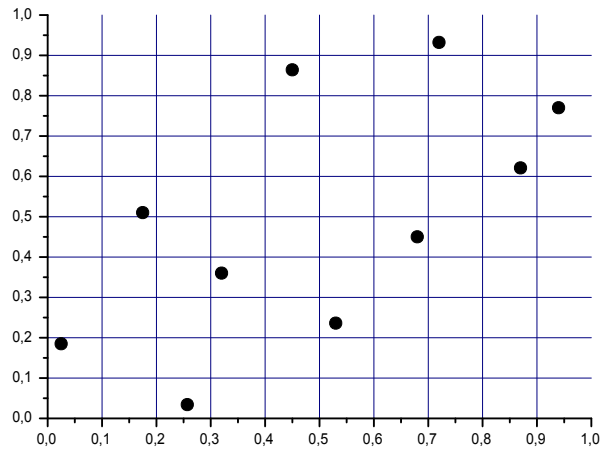


Figure 2.2 – 10 points issus d’un échantillonnage par hypercube latin en dimension 2

variables, alors la variance de l’estimateur I_n^{LHS} où les points sont échantillonnés à l’aide d’un hypercube latin, est inférieure à la variance de I_n^{MC} . Cependant, l’hypothèse de monotonie est, en pratique, rarement satisfaite : on dispose alors d’un résultat asymptotique [Ste87], qui garantit, lorsque h est de carré intégrable et lorsque n tend vers l’infini, une diminution de la variance de l’estimateur I_n^{LHS} par rapport à celle de I_n^{MC} . De plus, cette diminution est d’autant plus importante que h est proche d’une fonction additive.

Discussion

L’échantillonnage par hypercube latin présente l’avantage d’échantillonner uniformément chaque intervalle de définition de chaque variable. De plus, sous l’hypothèse de monotonie de la fonction, il existe des preuves théoriques de la réduction de la variance de l’estimateur. Toutefois, les méthodes de réduction de variance, et l’échantillonnage par hypercube latin en particulier, ne changent pas la décroissance de l’erreur (2.2) en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$. En outre, dans les applications à la SIR, les hypothèses de monotonie n’ont aucune raison d’être satisfaites. Des exemples de fonctions non-monotones ont montré que l’échantillonnage par hypercube latin pouvait donner des résultats moins bons qu’un échantillonnage aléatoire [HS95] lorsque le nombre de points est fini.

Comme nous l'avons évoqué dans la section 2.1, le caractère aléatoire des points est moins important que leur distribution uniforme. Le caractère aléatoire des points n'est intéressant que dans la mesure où asymptotiquement, il mène au remplissage de l'hypercube unité. D'où l'idée de remplacer les points aléatoires par des points issus de suites déterministes ayant une distribution plus uniforme. C'est le principe de la méthode de quasi-Monte Carlo (QMC).

2.3 La méthode de Quasi-Monte Carlo

Avant de détailler la méthode quasi-Monte Carlo, nous donnons un bref aperçu de son principe.

Le principal but de la méthode quasi-Monte Carlo est de trouver de meilleures estimations d'erreur que les erreurs probabilistes des méthodes Monte Carlo et d'avoir une vitesse de convergence plus rapide. Pour cela, on utilise des points issus de suites déterministes réparties uniformément dans l'espace. Pour quantifier l'écart à l'uniformité d'une suite finie de points, on utilise un critère appelé discrédance. On peut trouver dans la littérature un grand nombre de discrédances. L'une d'entre elles est la discrédance infinie à l'origine, notée $D_{\infty,*}$. Les suites déterministes utilisées pour la méthode quasi-Monte Carlo sont appelées les suites quasi-aléatoires ou suites à discrédance faible. Pour estimer l'intégrale I d'une fonction h définie sur $[0, 1]^s$, on utilise l'estimateur suivant :

$$\int_{[0,1]^s} h(t)dt \approx I_n^{QMC} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \quad (2.4)$$

où les points (x_1, \dots, x_n) sont issus d'une suite déterministe de $[0, 1]^s$. La qualité de cet estimateur dépend de la discrédance de la suite utilisée ainsi que de la variation de la fonction. Plus précisément, pour toute suite finie de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ de $[0, 1]^s$, l'erreur d'intégration est donnée par la borne de Koksma-Hlawka [Hla61] :

$$\left| I - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \right| \leq V(h)D_{\infty,*}(x). \quad (2.5)$$

où $V(h)$ est la variation de h au sens de Hardy-Krause (cette notion sera détaillée à la section

2.3.2). Ainsi, cette inégalité nous permet, comme dans le cas de la méthode Monte Carlo, de majorer l'erreur par un facteur ne dépendant que de la fonction et d'un facteur ne dépendant que des points utilisés.

Nous commençons cette section en donnant quelques définitions de discrédances 2.3.1. Nous détaillons dans la section 2.3.2, les majorations de l'erreur d'intégration associées. Enfin, nous décrivons la construction de quelques suites à discrédance faible dans la section 2.3.3.

2.3.1 La discrédance

La discrédance est une mesure de l'écart existant entre une situation de référence (l'uniformité théorique) et une configuration donnée. Soient n points $x = (x_1, \dots, x_n)$ dans $[0, 1]^s$, $x_i = (x_i^1, \dots, x_i^s)$ pour $i = 1, \dots, n$ et $t = (t^1, \dots, t^s) \in [0, 1]^s$. La discrédance locale disc est définie par

$$\text{disc}(t) = \frac{A(t, x)}{n} - \prod_{j=1}^s t^j \quad (2.6)$$

où $A(t, x)$ est le nombre de points de x qui appartiennent au pavé $P = [0, t^1[\times \dots \times [0, t^s[$.

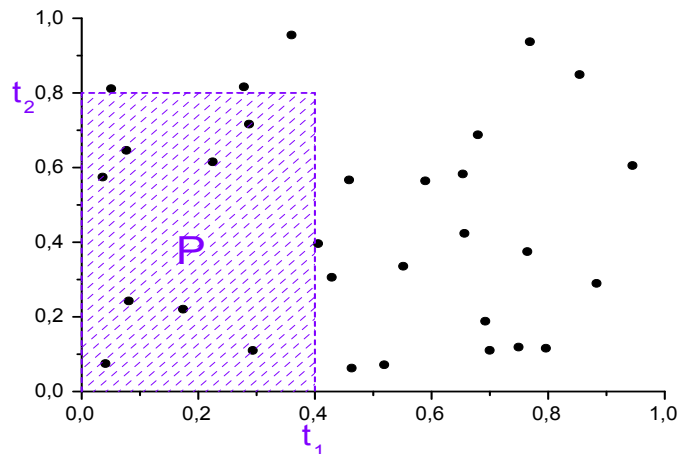


Figure 2.3 – Une suite finie de $n = 30$ points en dimension 2 et un pavé $P = [0, t^1] \times [0, t^2]$.

Comme on peut le voir sur la figure 2.3, pour que la répartition se rapproche de l'uniformité, on s'attend à ce que la proportion des points situés dans le pavé P de $[0, 1]^2$ soit proche de son aire $\lambda(P) = \prod_{j=1}^2 t^j$. Par conséquent, il semble naturel de juger peu uniforme une suite finie pour laquelle il est possible d'exhiber un pavé avec une grande différence entre les deux, c'est-à-dire une importante discrédance locale (2.6). Cette idée exprime la notion d'équirépartition :

Définition 2.1.

Une suite de points $x = (x_1, x_2, \dots)$ est dite **équirépartie** si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{P=[0, t^1] \times \dots \times [0, t^s] \subset [0, 1]^s} \left| \frac{A(t, x)}{n} - \lambda(P) \right| = 0$$

où $\lambda(P) = \prod_{j=1}^s t^j$.

Cette dernière égalité peut s'écrire

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{P=[0, t^1] \times \dots \times [0, t^s] \subset [0, 1]^s} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s \mathbb{I}_{\{x_i^j \leq t^j\}} - \prod_{j=1}^s t^j \right| = 0.$$

Ce qui signifie qu'une suite est équirépartie lorsque sa fonction de répartition empirique converge vers la fonction de répartition uniforme. On voit ainsi qu'une suite de variables aléatoires uniformes indépendantes est équirépartie. La définition de discrédance découle directement de cette notion :

Définition 2.2.

La **discrédance infinie à l'origine** d'une suite finie de n points $x = (x_1, \dots, x_n)$ de $[0, 1]^s$, notée $D_{\infty, *}$, est la norme L_∞ de la discrédance locale (2.6) :

$$D_{\infty, *}(x) = \sup_{t \in [0, 1]^s} | \text{disc}(t) | . \tag{2.7}$$

Le qualificatif "à l'origine" signifie que les pavés sont ancrés en 0. En dimension $s = 1$, cette

discrédance est facile à calculer (voir [Nie72] et [Nie92]). De même, il existe des résultats sur le calcul explicite de la discrédance infinie à l'origine en dimension $s = 2$ (voir [Cle86] et [BZ93]). En dimension $s > 2$, il a été montré dans [Nie72] que le problème était discrédisable et pouvait être résolu en un nombre fini d'étapes. Cependant, la complexité des algorithmes croît de manière exponentielle avec la dimension et ils sont donc inutilisables en dimension élevée. C'est pourquoi en pratique on se contente de bornes. Le théorème suivant donne une borne inférieure pour la discrédance classique à l'origine [Rot54].

Théorème 2.1.

Il existe une constante $B_s > 0$ ne dépendant que de la dimension s , telle que pour toute suite $x = (x_1, x_2, \dots)$ de $[0, 1]^s$, on a

$$D_{\infty,*}(x) \geq B_s \frac{(\log(n))^{s/2}}{n}$$

pour une infinité de valeurs de n .

Le théorème 2.1 montre que les suites à discrédance faible, c'est-à-dire dont la discrédance est en $\mathcal{O}(\frac{(\log n)^s}{n})$, sont proches de l'optimalité. De plus, la discrédance d'une suite aléatoire uniforme est en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$ ([Kie61] et [Zar71]), par conséquent les suites à discrédance faible permettent de gagner approximativement, un facteur \sqrt{n} au dénominateur. Nous exposons, dans la section 2.3.3, quelques résultats sur la majoration de la discrédance infinie à l'origine pour certaines suites. De plus, le théorème de Koksma-Hlawka lie la discrédance infinie à l'origine à l'erreur d'intégration (voir section 2.3.2).

Il existe d'autres discrédances pour lesquelles, contrairement à la discrédance infinie à l'origine, on dispose de formules simples à mettre en œuvre. La discrédance carrée moyenne correspond à la norme L_2 de la discrédance locale.

Définition 2.3.

La **discrédance en norme L_2 -étoile**, appelée aussi **discrédance carrée moyenne à l'origine** $D_{L_2,*}$ d'une suite finie $x = (x_1, \dots, x_n)$ de n points de $[0, 1]^s$ est donnée par

$$D_{L_2,*}(x) = \left[\int_{[0,1]^s} \text{disc}^2(t) dt \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Il existe d'autres discrédances en norme L_2 ([Hic98], [Hic00], [L'E09], [LL02]). Dans cette thèse, nous n'utilisons que la discrédance en norme L_2 -étoile. On a clairement

$$0 < D_{L_2,*}(x) \leq D_{\infty,*}(x) \leq 1$$

Dans [War72], pour une suite finie $x = (x_1, \dots, x_n)$ de n points de $[0, 1]^s$, la définition 2.3 devient :

$$D_{L_2,*}^2(x) = \left(\frac{1}{3}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s \left(\frac{1}{2} - \frac{(x_i^j)^2}{2}\right) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^s [1 - \max(x_i^j, x_k^j)]. \quad (2.8)$$

Cette formulation permet d'implémenter facilement le calcul de la discrédance carrée moyenne.

Toutefois, Matousek [Mat98] met en évidence l'incapacité de la discrédance en norme L_2 -étoile à quantifier la non-uniformité d'une suite de points en grande dimension lorsque le nombre de points est restreint. Plus précisément, on peut montrer que dans le cas pathologique extrême de la suite de n points constituée de n répliques du point $(1, \dots, 1)$, si n n'est pas suffisamment grand pour la dimension s , la discrédance en norme L_2 -étoile de cette suite est proche de la borne inférieure de la discrédance en norme L_2 -étoile de n points quelconques en dimension s .

Le concept de discrédance peut se généraliser à n'importe quelle norme L_p , mais à l'heure actuelle, on ne dispose de formules explicites que pour la discrédance carrée moyenne.

Cependant, cette discr pance, comme la discr pance infinie   l'origine, ne tient pas compte d' ventuelles sp cificit s de la fonction   int grer. En particulier, la plupart des suites   discr pance faible, que nous verrons   la section 2.3.3, pr sentent des irr gularit s de r partition lorsqu'on les projette de l'espace $[0, 1]^s$ sur $[0, 1]^d$ avec $1 < d \ll s$. Or toutes les variables et interactions n'ont pas toujours le m me poids pour la fonction. On imagine alors ais ment que si une projection mal distribu e correspond   une interaction importante, le r sultat de l'estimation de l'int grale risque d' tre mauvais. Par cons quent, l' cart   l'uniformit  dans l'hypercube $[0, 1]^s$ n'est pas forc ment la mesure la plus adapt e au regard de l'int grande. C'est pourquoi, l'article [SW98] introduit une nouvelle discr pance qui permet de pond rer les discr pances des projections de la suite finie de points et qui intervient dans une majoration de l'erreur d'int gration (comme nous le verrons dans la section 2.3.2).

D finition 2.4.

La **discr pance en norme L_2 - toile pond r e** $D_{L_2,*,\gamma}$ d'une suite finie $x = (x_1, \dots, x_n)$ de n points de $[0, 1]^s$ est donn e par

$$D_{L_2,*,\gamma}(x) = \left[\sum_{\emptyset \neq u \subseteq \{1, \dots, s\}} \gamma_u D_{L_2,*}(x^u) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

o  $\gamma = (\gamma_u)_{\emptyset \neq u \subseteq \{1, \dots, s\}}$ est l'ensemble des poids r els positifs et x^u est la projection de x sur le sous-espace des variables indic es dans u .

La formule de la discr pance carr e moyenne (2.8) permet de calculer facilement la discr pance L_2 - toile pond r e. Cependant, lorsque la dimension est grande, le nombre de termes dans la somme (2.9) est tr s  lev  et ceci peut rendre le calcul de la discr pance L_2 - toile pond r e relativement long. Ainsi, Joe, dans [Joe97], d veloppe une formule explicite de la discr pance L_2 - toile pond r e lorsque les poids sont d finis par :

$$\begin{cases} 0 \leq \gamma_s \leq \dots \leq \gamma_1 \\ \gamma_u = \prod_{j \in u} \gamma_j. \end{cases} \quad (2.10)$$

En utilisant les poids produits (2.10), on a [Joe97] :

$$D_{L_2,*,\gamma}(x) = \prod_{j=1}^s \left(1 + \frac{\gamma_j}{3}\right) - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s \left(1 + \frac{\gamma_j}{2} [1 - (x_i^j)^2]\right) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^s (1 + \gamma_j [1 - x_i^j]) \\ + \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n \prod_{j=1}^s (1 + \gamma_j [1 - \max(x_i^j, x_k^j)]).$$

Le concept de discrédance L_2 -étoile pondérée a été étendu à la norme L_p , [Hic98], et le même résultat a été obtenu par F. J. Hickernell [Hic98] à travers la théorie des espaces à noyau reproduisant. La théorie des espaces de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS) est un outil puissant pour les démonstrations liées à l'erreur d'intégration. Dans ce contexte, il est possible de définir une discrédance associée à un noyau reproduisant. Nous abordons ce point dans la section suivante 2.3.2.

2.3.2 Estimation d'erreur

La méthode quasi-Monte Carlo dispose d'une majoration de l'erreur donnée par le théorème de Koksma-Hlawka [Hla61], appelée borne de Koksma-Hlawka ou inégalité de Koksma-Hlawka. Avant d'énoncer ce théorème, nous introduisons quelques définitions. Soit \mathcal{P} une partition de l'hypercube unité $[0, 1]^s$

$$\mathcal{P} = \left\{ P = \prod_{j=1}^s [z_{i_j}^j, z_{i_j+1}^j[\text{ tel que } 0 \leq i_j < n_j \text{ et } 0 = z_0^j < \dots < z_{n_j}^j = 1 \forall j = 1, \dots, s \right\}$$

A tout pavé P de $[0, 1]^s$ de la forme :

$$P = \prod_{j=1}^s [x_0^j, x_1^j[,$$

on fait correspondre la somme alternée :

$$\Delta(h, P) = \sum_{e_1=0}^1 \dots \sum_{e_s=0}^1 (-1)^{e_1+\dots+e_s} h(x_{e_1}^1, \dots, x_{e_s}^s)$$

Définition 2.5.

Pour toute fonction $h : [0, 1]^s \rightarrow \mathbb{R}$, la **variation** s -dimensionnelle $V^{(s)}(h)$ de h **au sens de Vitali** est donnée par :

$$V^{(s)}(h) = \sup_{\mathcal{P}} \sum_{P \in \mathcal{P}} |\Delta(h, P)|$$

où le supremum est pris sur l'ensemble des partitions de l'hypercube unité. Si $V^{(s)}(h) < \infty$, alors h est dite à variation bornée au sens de Vitali.

Lorsque la dérivée partielle $\frac{\partial^s h}{\partial X^1 \dots \partial X^s}$ est continue, on peut utiliser la définition suivante pour la variation s -dimensionnelle au sens de Vitali :

$$V^{(s)}(h) = \int_{[0,1]^s} \left| \frac{\partial^s h}{\partial X^1 \dots \partial X^s} \right| dX^1 \dots dX^s.$$

On note $V^{(j)}(h; i_1, \dots, i_j)$ la variation j -dimensionnelle au sens de Vitali de la restriction de h à l'ensemble $\{X \in [0, 1]^s \mid X^l = 1, \forall l \neq i_1, \dots, i_j\}$.

Définition 2.6.

Pour toute fonction $h : [0, 1]^s \rightarrow \mathbb{R}$, la **variation** $V(h)$ de h **au sens de Hardy-Krause** est donnée par :

$$V(h) = \sum_{j=1}^s \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_j \leq s} V^{(j)}(h; i_1, \dots, i_j).$$

Si $V(h) < \infty$, alors h est dite à variation bornée au sens de Hardy-Krause.

Pour que la fonction soit à variation bornée au sens de Hardy-Krause il faut non seulement que la fonction soit à variation bornée au sens de Vitali mais aussi que toutes les restrictions de h aux projections sur les faces de l'hypercube unité le soit aussi.

Le théorème de Koksma-Hlawka fait intervenir la notion de variation au sens de Hardy-Krause pour majorer l'erreur d'intégration :

Théorème 2.2.

Si h est une fonction à variation bornée au sens de Hardy-Krause, alors pour toute suite finie de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ sur $[0, 1]^s$, on a :

$$\left| I - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \right| \leq V(h) D_{\infty,*}(x). \quad (2.11)$$

Le théorème suivant [Nie92] nous indique que l'inégalité de Koksma-Hlawka est en général la meilleure possible.

Théorème 2.3.

Pour toute suite finie $x = (x_1, \dots, x_n)$ de $[0, 1]^s$ et pour tout $\varepsilon > 0$, il existe une fonction $h \in \mathcal{C}^\infty([0, 1]^s)$ et $V(h) = 1$, telle que

$$\left| I - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \right| > D_{\infty,*}(x) - \varepsilon.$$

La majoration donnée par le théorème 2.2 est composée de deux termes. La variation, qui reflète l'irrégularité de la fonction, ne dépend que de la fonction. La discrédance, qui mesure l'irrégularité de répartition des points, ne dépend que de la suite finie de points. Le calcul de cette borne s'avère très difficile en pratique. Nous avons expliqué qu'il n'existait pas de formule simple à mettre en œuvre pour le calcul de la discrédance infinie à l'origine. C'est la raison pour laquelle les majorations de la discrédance infinie à l'origine des suites quasi-aléatoires, en $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right)$, que nous détaillerons dans la section 2.3.3, sont largement utilisées. La variation au sens de Hardy-Krause s'avère également très difficile à calculer en pratique. Dans notre cas, la fonction que l'on cherche à intégrer est une indicatrice à variation infinie. Par conséquent la borne de Koksma-Hlawka (2.11) ne s'applique pas à notre fonction. Cette borne est d'autant plus utilisée qu'elle est vérifiée pour le pire cas des fonctions à variation bornée. Cependant, la fonction d'intérêt n'est pas toujours le pire des cas et il pourrait être

avantageux de disposer d'une borne peut-être moins générale mais qui donne une meilleure estimation de l'erreur dans le cas de la fonction d'intérêt. Dans le cas des fonctions à variation bornée au sens de Hardy-Krause, l'inégalité (2.11) et la majoration de la discrédance permettent de déduire que la vitesse de convergence de la méthode quasi-Monte Carlo est en $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right)$. De plus, en grande dimension, à moins de disposer d'un très grand nombre de points, la méthode Monte Carlo, dont la vitesse de convergence est indépendante de la dimension, devrait donner de meilleurs résultats que la méthode QMC. Or, en pratique, il a été observé que même en grande dimension, plusieurs centaines de variables dans les études concernées, la méthode QMC donnait de bons résultats [PT95], [NT96], [CMO97], [ABG98], [L'E04], [IT06]. Comme nous l'avons expliqué au chapitre précédent, les notions de dimension effective au sens de la troncature et de la superposition introduites par Caffisch, Morokoff et Owen [CMO97] pourraient fournir une explication à ces observations. Cependant, le calcul des indices de Sobol (1.11) intervenant dans la définition de la dimension effective, nécessite un grand nombre d'évaluations de la fonction. Par ailleurs, Liu et Owen [LO06] définissent la dimension moyenne (équation (1.12)) et l'utilisent pour prédire l'amélioration apportée par la méthode QMC par rapport à la méthode Monte-Carlo. Bien que la dimension moyenne soit un critère plus facilement calculable et adapté à la fonction d'intérêt, il ne garantit pas une bonne estimation d'intégrale par la méthode QMC dans la mesure où il n'existe pas de majoration de l'erreur la faisant intervenir. D'autre part, la dimension moyenne est un critère qui ne porte que sur la fonction. Par conséquent, il ne permet pas de comparer différentes suites à discrédance faible. En revanche la discrédance L_2 -étoile pondérée semble être un critère pouvant inclure à la fois les spécificités de la fonction d'intérêt ainsi que celles de la suite utilisée pour l'estimation de l'intégrale. De plus, Sloan et Wozniakowski définissent la borne de Koksma-Hlawka pondérée [SW98] pour la discrédance L_2 -étoile pondérée. Pour toute suite finie de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ et pour toute fonction h définie sur un produit s -dimensionnel d'espaces de Sobolev, on a :

$$\left| I - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \right| \leq \|h\|_{s,\gamma} D_{L_2,*,\gamma}(x) \quad (2.12)$$

où $D_{L_2,*,\gamma}(x)$ est la discrédance L_2 -étoile pondérée (2.9), de la suite finie x et

$$\|h\|_{s,\gamma} = \left(\sum_{u \subset \{1,\dots,s\}} \gamma_u^{-1} \int_{[0,1]^{|u|}} \left| \frac{\partial^{|u|} h(X^u, 1)}{\partial X^u} \right|^2 dX^u \right)^{1/2} \quad (2.13)$$

avec $h(X^u, 1)$ la restriction de h à l'ensemble $\{X = (X^1, \dots, X^s) \in [0, 1]^s \text{ tels que } X^j = 1 \text{ pour } j \notin u\}$. Remarquons que l'égalité (2.13) n'a lieu que pour des poids γ_u strictement positifs. Dans le cas où certains γ_u seraient nuls, on adopte la convention $0/0 = 0$ dans l'inégalité (2.12). De plus, les dérivées sont ici à prendre au sens des distributions. Il est possible de généraliser l'inégalité de Koksma-Hlawka [Hic98] à d'autres discrédances telle que la discrédance en norme L_2 -étoile ou la discrédance en norme L_p . Cette généralisation nécessite une redéfinition de la variation. Dans chacun des cas, la démonstration est fondée sur la théorie des espaces de Hilbert à noyaux reproduisants. Le principe général est le suivant. Soit (H, \langle, \rangle) un espace de Hilbert de fonctions réelles sur $[0, 1]^s$, où \langle, \rangle est le produit scalaire sur H . Pour tout $X \in [0, 1]^s$, on définit la fonctionnelle T_X par

$$T_X(h) = h(X), \quad \forall h \in H.$$

Si la fonctionnelle T_X est bornée, alors par le théorème de représentation de Riesz, il existe un unique noyau reproduisant $K(\cdot, X) \in H$ tel que

$$h(X) = T_X(h) = \langle K(\cdot, X), h \rangle, \quad \forall h \in H \quad \forall X \in [0, 1]^s.$$

De même, pour toute fonctionnelle linéaire bornée $T \in H$, par le théorème de Riesz, il existe un unique représentant ζ tel que

$$T(h) = \langle \zeta, h \rangle, \quad \forall h \in H.$$

De plus $\zeta(X) = T_X(\zeta) = \langle K(\cdot, X), \zeta \rangle = T(K(\cdot, X))$. Ainsi, le représentant de toute fonctionnelle linéaire bornée peut s'exprimer à l'aide du noyau K . On définit l'erreur d'intégration e

de l'intégrale $I(h) = \int_{[0,1]^s} h(t)dt$ avec l'estimateur $I_n(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i)$ par :

$$e(h) = (I - I_n)(h)$$

Si la fonctionnelle linéaire T correspondant à l'erreur d'intégration e est bornée, alors son représentant ξ peut être exprimé à l'aide du noyau K :

$$e(h) = \langle \xi, h \rangle, \forall h \in H$$

où $\xi(X) = \langle K(\cdot, X), \xi \rangle = e(K(\cdot, X))$.

L'inégalité de Cauchy-Schwartz implique alors :

$$|e(h)| = |\langle \xi, h \rangle| \leq \|\xi\| \|h\| \quad (2.14)$$

où $\|\cdot\|$ est la norme induite par le produit scalaire sur H . On a égalité lorsque h est un multiple constant de ξ . En se ramenant à la boule unité $\{h \in H \text{ telles que } \|h\| \leq 1\}$, ξ est l'intégrande pire cas. La quantité $\|\xi\|$ ne dépend que des points choisis et peut être identifiée à la discrépanance. La discrépanance est alors l'erreur dans le pire des cas de la boule unité $\{h \in H \text{ telles que } \|h\| \leq 1\}$. De même, $\|h\|$ peut être identifiée à la variation.

Ainsi, à un choix de norme on peut faire correspondre une discrépanance associée au noyau reproduisant ainsi qu'une variation, pour obtenir l'inégalité (2.14) correspondante. A titre d'exemple, prenons $H = \{h \text{ définie sur un espace produit de Sobolev, } \|h\|_H < \infty\}$ muni de la norme, $\|\cdot\|_H$, définie par :

$$\|h\|_H^2 = \sum_{u \subseteq \{1, \dots, s\}} \frac{1}{\gamma_u} \int_{[0,1]^u} \left(\frac{\partial^{|u|}}{\partial X^u} h(X^u, 1) \right)^2 dX^u.$$

Alors, le noyau reproduisant K^* , associé à l'espace de Hilbert H est donné par [SW98]

$$K^*(Z, X) = \sum_{u \subseteq \{1, \dots, s\}} \gamma_u \prod_{j \in u} \min(1 - Z^j, 1 - X^j)$$

et la discrépanance correspondante est la discrépanance L_2 -étoile pondérée (2.9). Inversement,

pour toute discr eance, il existe une et une seule norme telle que l'in egalit e (2.14) ait lieu.

L' etude de Morokoff et Caflisch [MC95], s'int eresse au cas particulier des fonctions indicatrices et plus pr ecis ement aux fonctions indicatrices   support convexe. En supposant que, au voisinage de la fronti ere d'un convexe quelconque C , le comportement de l'erreur associ ee au pourcentage de points de la suite qui appartiennent   ce voisinage compar e   la mesure de la fronti ere, est similaire,   une constante pr es,   celui attendu de l'erreur obtenue avec une s equence al eatoire uniforme, alors pour toute suite de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ de $[0, 1]^s$ de discr eance $D_{\infty,*}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}$, on a :

$$\sup_{C \in \mathcal{C}} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{x_i \in C\}} - \int_C \mathbb{1}_{\{X \in C\}} dX \right| \leq C_s \left(\frac{D_{\infty,*}(x)}{n^{s-1}} \right)^{\frac{1}{2s-1}}$$

o  \mathcal{C} est la classe des convexes sur $[0, 1]^s$ et C_s est une constante ne d ependant que de la dimension. En utilisant l'approximation optimiste $\frac{1}{n}$ pour $D_{\infty,*}(x)$, on obtient

$$|I_n^{QMC} - I| \leq C_s \frac{1}{n^{\frac{s}{2s-1}}}.$$

Cette  tude permet de mettre en  vidence que, pour une fonction indicatrice en grande dimension, le comportement de l'erreur d'int egration d epend essentiellement de l' chantillonnage au voisinage de la fronti ere du support. On peut constater que dans ce cas, la variation de la fonction n'appara t pas dans la majoration de l'erreur d'int egration. Cette majoration de l'erreur d'int egration pourrait sembler plus adapt ee   la pr ediction d'un gabarit de SIR que la borne de Koksma-Hlawka dans la mesure o  la fonction d'int er et est une indicatrice. Malheureusement, cette majoration n'est v erifi ee que dans le cas des indicatrices   support convexe, et il est peu probable que l'ensemble $\{X \in [0, 1]^s | f(X) < \text{seuil}\}$, o  f d esigne la SIR, soit un convexe de \mathbb{R}^s .

Comparaison des majorations de l'erreur d'int egration

La complexit e du calcul de la discr eance infinie ainsi que celle du calcul de la variation au sens de Hardy-Krause rend la borne de Koksma-Hlawka inutilisable en pratique. L' tude de Morokoff et Caflisch [MC94] montre que la variation n'est pas une quantit e tr es

importante pour la détermination de l'erreur d'intégration. On utilise en général une majoration de la discrédance pour prédire l'erreur d'intégration. Cependant, cette majoration est relativement grossière et croît avec la dimension, par conséquent elle ne reflète pas le comportement de l'erreur en grande dimension avec un nombre de points restreint. De plus, la borne de Koksma-Hlawka est valable pour le pire cas d'intégrande. Par conséquent, pour une intégrande particulière, l'erreur d'intégration dans le pire des cas peut être loin de l'erreur d'intégration pour la fonction d'intérêt. Il existe des variantes de cette majoration faisant appel à des quantités plus simples à calculer. En particulier, d'autres discrédances, telles que la discrédance en norme L_2 -étoile, en supposant que la variation de la fonction est inférieure à 1, permettent de connaître l'erreur commise lors de l'intégration par la méthode QMC. Les discrédances telles que la discrédance en norme L_2 -étoile ne tiennent pas compte des spécificités de la fonction d'intérêt. En particulier, elles ne permettent pas de distinguer une suite, dont les projections, sur des sous-espaces de petite dimension et significatives pour la fonction d'intérêt, sont bien échantillonnées d'une suite dont, à l'inverse, les projections significatives sont mal échantillonnées. C'est pourquoi Sloan et Wozniakowski ont introduit la discrédance L_2 -étoile pondérée permettant d'accorder plus d'importance à certains groupes de variables et fournissent une majoration de l'erreur la faisant intervenir. Joe a montré qu'avec des poids particuliers, la formulation de la discrédance L_2 -étoile pondérée se simplifiait et devenait alors plus rapidement calculable. Dans ce cas, les interactions des variables sont pondérées par des poids produits. Cependant ces poids ne correspondent pas à l'importance des variables dans le cas d'une SIR. Une pondération par les indices de Sobol (1.11) permet d'obtenir une discrédance adaptée à la fonction d'intérêt. Cependant, en dimension élevée, le nombre d'indices à calculer est grand. Or l'estimation de chaque indice nécessite un grand nombre d'évaluations de la fonction. Par conséquent, cette pondération n'est pas réalisable en grande dimension lorsque l'évaluation de la fonction est coûteuse.

La section suivante est consacrée à la définition de quelques suites à discrédance faible ainsi qu'à l'énonciation de quelques résultats les concernant. Ces suites seront utilisées pour des comparaisons numériques aux chapitres 4 et 5.

2.3.3 Les suites à discrédance faible

2.3.3.1 Les suites de Van Der Corput

Les suites de Van Der Corput sont des suites à discrédance faible en dimension $s = 1$. Bien que la SIR dépende de plus d'une variable, nous présentons ces suites car elles sont à l'origine de constructions plus générales en dimension s quelconque.

Soit un entier $b \geq 2$. Tout entier $i \in \mathbb{N}$ peut se décomposer dans la base b de manière unique :

$$i = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(i)b^k, \quad \text{avec } c_k(i) \in \{0, \dots, b-1\} \forall k \in \mathbb{N}. \quad (2.15)$$

On remarque que les coefficients $c_k(i)$ sont nuls pour tout $k > 1 + \lfloor \log_b(i) \rfloor$, où $\lfloor \cdot \rfloor$ désigne la partie entière inférieure. Par conséquent, la somme précédente est finie. A partir de cette décomposition, on définit la fonction radicale inverse par :

$$\varphi_b(i) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(i)b^{-k-1}, \quad \text{pour tout } i \in \mathbb{N}.$$

On a $\varphi_b(i) \in [0, 1[$ pour tout $i \in \mathbb{N}$.

Définition 2.7.

Soit un entier $b \geq 2$. La suite $VDC_b = (x_0, x_1, \dots) \in [0, 1[$ donnée par

$$x_i = \varphi_b(i)$$

est appelée **suite de Van Der Corput en base b** .

La figure 2.4 illustre la construction d'une suite de Van Der Corput. Il s'agit dans ce cas particulier de la suite de Van Der Corput en base 3.

Le théorème suivant, dû à H. Faure [Fau81], nous donne un résultat asymptotique sur la discrédance infinie à l'origine d'une suite de Van Der Corput en base b .

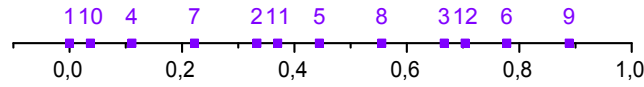


Figure 2.4 – Les 12 premiers points de la suite de Van Der Corput en base 3.

Théorème 2.4.

Soit VDC_b la suite de Van Der Corput en base b . On a :

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{nD_{\infty,*}(VDC_b)}{\log n} = \begin{cases} \frac{b^2}{4(b+1)\log b} & \text{pour } b \text{ pair} \\ \frac{b-1}{4\log b} & \text{pour } b \text{ impair.} \end{cases} \quad (2.16)$$

On déduit de ce théorème que, asymptotiquement en n , par croissance de ces deux fonctions de b , VDC_3 est la meilleure suite de Van Der Corput.

En introduisant dans la définition 2.7 une permutation des éléments de $\{0, \dots, b-1\}$, il est possible d'obtenir des suites en dimension 1 présentant une discrédance asymptotique plus faible que celle des suites de Van Der Corput standards.

Définition 2.8.

Soit un entier $b \geq 2$ et une permutation σ de $\{0, \dots, b-1\}$. La suite $VDC_b^\sigma = (x_0, x_1, \dots) \in [0, 1[$ donnée par

$$x_i = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma(c_k(i))b^{-k-1}$$

est appelée **suite de Van Der Corput généralisée** (ou permutée) en base b .

Les permutations permettent d'améliorer la discrédance. Par exemple, en base $b = 12$, avec la notation classique d'un cycle, la permutation $\sigma = (0, 5, 9, 3, 7, 1, 10, 4, 8, 2, 6, 11)$, permet de réduire d'un facteur deux la limite supérieure (2.16) par rapport à celle de la meilleure suite de Van Der Corput Standard C_3 ([Fau81]).

Kritzer a montré dans [Kri05] que les suites de Van Der Corput standard sont les plus mauvaises, en terme de discrédance infinie à l'origine, parmi une classe de suite, les $(0, 1)$ -suites, que nous aborderons dans la section 2.3.3.6.

2.3.3.2 Les suites de Halton

Les suites de Halton [Hal60] sont une généralisation en dimension $s \geq 1$ des suites de Van Der Corput.

Définition 2.9.

Soient b_1, \dots, b_s , s entiers positifs premiers entre eux. La suite $H_{b_1, \dots, b_s} = (x_1, x_2, \dots)$ donnée par

$$x_i = (\varphi_{b_1}(i), \dots, \varphi_{b_s}(i))$$

est appelée la **suite de Halton** en bases b_1, \dots, b_s .

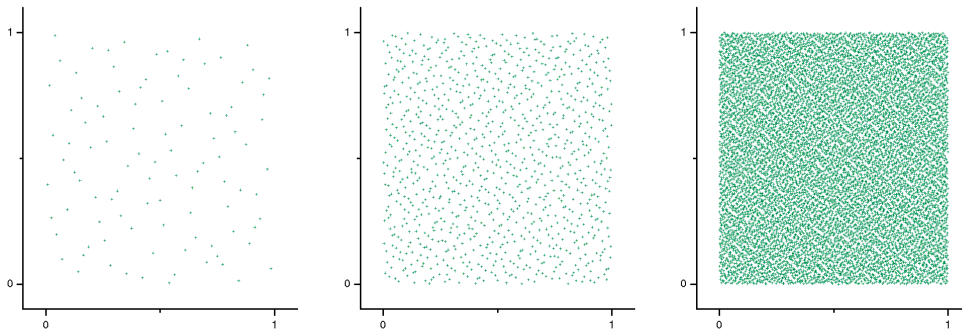


Figure 2.5 – Les 100, 1000 et 10000 premiers points de la suite de Halton en bases 2 et 3.

Le théorème suivant [Mei68], donne une majoration de la discrédance infinie d'une suite de Halton.

Théorème 2.5.

La discrétion infinie à l'origine des $n \in \mathbb{N}^*$ premiers points d'une suite de Halton H_{b_1, \dots, b_s} vérifie :

$$D_{\infty, *}(H_{b_1, \dots, b_s}) \leq \frac{s}{n} + \frac{1}{n} \prod_{j=1}^s \left(\frac{b_j - 1}{2 \log b_j} \log n + \frac{b_j + 1}{2} \right).$$

Cette dernière inégalité peut s'écrire

$$D_{\infty, *}(H_{b_1, \dots, b_s}) \leq C_s \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right)$$

où

$$C_s = \prod_{j=1}^s \frac{b_j - 1}{2 \log b_j}.$$

Atanassov [Ata04] a, par la suite, amélioré ce résultat en montrant que la constante C_s était en fait égale à

$$C_s = \frac{1}{s!} \prod_{j=1}^s \frac{b_j - 1}{\log b_j}.$$

La constante C_s est croissante par rapport à chaque b_j , $j = 1, \dots, s$, par conséquent, pour qu'elle soit minimale, il faut choisir pour bases les s premiers entiers premiers. Cependant, elle croît de manière exponentielle avec la dimension, ce qui affaiblit l'efficacité de la majoration en grande dimension.

2.3.3.3 Les suites finies de Hammersley

Une suite finie de n points de Hammersley [Ham60] en dimension s est construite à partir d'une suite finie de n points d'une suite de Halton en dimension $n - 1$.

Définition 2.10.

Soient b_1, \dots, b_{s-1} , $s - 1$ entiers premiers positifs distincts. La suite finie de $n \in \mathbb{N}^*$ points

$H_{n,b_1,\dots,b_s} = (x_1, \dots, x_n)$ donnée par

$$x_i = \left(\frac{i}{n}, \varphi_{b_1}(i), \dots, \varphi_{b_{s-1}}(i) \right)$$

est appelée **suite finie de Hammersley** en bases b_1, \dots, b_{s-1} .

La majoration de la discrédance infinie à l'origine est donnée par le théorème suivant.

Théorème 2.6.

Pour une suite finie de Hammersley de n points $H_{n,b_1,\dots,b_{s-1}}$, on a

$$D_{\infty,*}(H_{n,b_1,\dots,b_{s-1}}) \leq \frac{s}{n} + \frac{1}{n} \prod_{j=1}^{s-1} \left(\frac{b_j - 1}{2 \log b_j} \log n + \frac{b_j + 1}{2} \right).$$

Cette dernière inégalité peut s'écrire

$$D_{\infty,*}(H_{n,b_1,\dots,b_{s-1}}) \leq C_s \frac{(\log n)^{s-1}}{n} + \mathcal{O} \left(\frac{(\log n)^{s-2}}{n} \right)$$

où

$$C_s = \prod_{j=1}^{s-1} \frac{b_j - 1}{2 \log b_j}.$$

Comme pour une suite de Halton, on comprend que la constante C_s de la majoration sera minimale pour les bases correspondant aux $s - 1$ premiers entiers premiers. De plus, en dimension $s = 2$, des valeurs explicites ont été données dans [Cle86].

Le principe qui permet de passer d'une suite de Halton à une suite finie de Hammersley permet d'obtenir une meilleure majoration. Ce principe est général et peut s'appliquer à n'importe quelle suite à discrédance faible pour passer d'une suite à discrédance en $\mathcal{O} \left(\frac{(\log n)^s}{n} \right)$ à une suite finie de discrédance en $\mathcal{O} \left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n} \right)$. Cependant, si le nombre de points, n , n'est pas fixé à l'avance, changer n implique le changement de la première coordonnée de tous les points. Par conséquent, il ne sera pas possible d'ajouter n_2 points à l'estimateur I_n^{QMC} .

correspondant sans recalculer h sur l'ensemble des $n + n_2$ points.

2.3.3.4 Les suites de Sobol

Les suites de Sobol [Sob67] sont construites en utilisant des propriétés arithmétiques des polynômes sur \mathbb{Z}_2 . Nous ne détaillerons pas la construction de ces suites. Pour les applications, les suites de Sobol utilisées sont générées à l'aide du logiciel R qui reprend l'algorithme de Bratley et Fox [BF88].

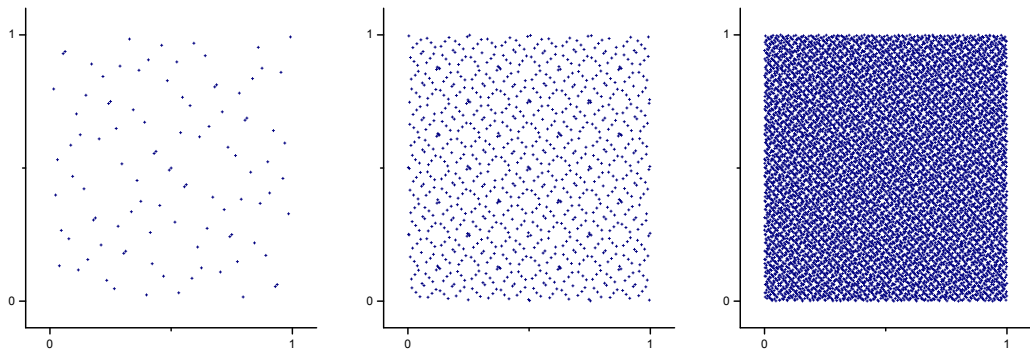


Figure 2.6 – Les 100, 1000 et 10000 premiers points d'une suite de Sobol.

La majoration de la discrédance d'une suite de Sobol est donnée par le théorème suivant [Sob67].

Théorème 2.7.

Pour une suite de Sobol S de n points en dimension s , on a

$$D_{\infty,*}(S) \leq \frac{2^{t_s}}{s!(\log 2)^s} \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right)$$

avec

$$k \frac{s \log s}{\log \log s} \leq t_s \leq \frac{s \log s}{\log 2} + \mathcal{O}(s \log \log s)$$

et $k > 0$.

Ce théorème permet tout d'abord de voir que le paramètre t_s d'une suite de Sobol croît approximativement de manière linéaire avec la dimension s . Sobol [Sob67] fournit les valeurs du paramètre t pour plusieurs dimensions s données. De plus, comme pour les suites de Halton, la constante $C_s = \frac{2^{t_s}}{s!(\log 2)^s}$ croît de manière exponentielle avec la dimension.

2.3.3.5 Les suites de Faure

Les suites de Faure sont définies à partir d'une base unique b , où $b \geq s$ est un entier premier.

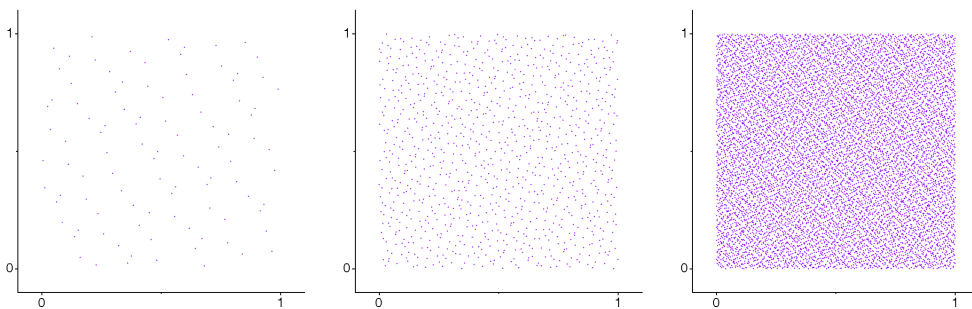


Figure 2.7 – Les 100, 1000, 10000 premiers points d'une suite de Faure en dimension $s = 2$ et en base $b = 3$.

Définition 2.11.

Soit $b \geq s$ un entier premier. Soient $B = (b_1, \dots, b_s)$, s éléments de $\{0, \dots, b-1\}$. La **suite de Faure** $F_{b,B} = (x_1, x_2, \dots)$ est définie par

$$x_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} x_i^{j,k} b^{-k} \text{ pour } i \geq 1 \text{ et } j = 1, \dots, s$$

où

$$x_i^{j,k} = \sum_{p=k}^{\infty} C_p^{k-1} b_j^{p-k+1} c_k(i) \pmod{b} \quad (2.17)$$

avec $c_k(i)$ pour $k \geq 1$, les coefficients de la décomposition de i dans la base b (2.15), et $C_p^k = \frac{p!}{(p-k)!k!}$ est un coefficient binomial.

Les coefficients $c_k(i)$ étant nuls pour $k > 1 + \lfloor \log_b i \rfloor$ les sommes de la définition ci-dessus sont en fait finies.

De même que pour les suites précédentes, il existe un théorème [Fau82] qui fournit une majoration de la discrédance des n premiers points d'une suite de Faure.

Théorème 2.8.

Pour une suite de Faure $F_{b,B}$ en dimension s , on a

$$D_{\infty,*}(F_{b,B}) \leq \begin{cases} \frac{3}{16(\log 2)^2} \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right) & \text{si } b = 2 \\ \frac{1}{s!} \left(\frac{b-1}{2 \log b}\right)^s \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right) & \text{si } b \geq 3. \end{cases}$$

Contrairement aux suites de Sobol et de Halton, la constante $C_s = \frac{1}{s!} \left(\frac{b-1}{2 \log b}\right)^s$, tend vers 0 lorsque la dimension tend vers l'infini. De plus, elle est inférieure à celles d'une suite de Sobol ou de Halton [Fau82]. C'est pour cette raison que les suites de Faure sont considérées comme meilleures que celles de Halton et de Sobol. Cependant, il est à noter que la constante dans $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right)$ explose avec la dimension.

2.3.3.6 Les (t, s) -suites et (t, m, s) -réseaux

Les (t, s) -suites sont une généralisation des suites de Van Der Corput, Sobol et Faure. Elles ont été introduite par H. Niederreiter [Nie87].

Définition 2.12.

Un **pavé élémentaire en base b** , $b \in \mathbb{N}^*$, P_b est un pavé de la forme

$$P_b = \prod_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b^{d_j}}, \frac{a_j + 1}{b^{d_j}} \right)$$

où $a_j, d_j \in \mathbb{N}$ et $a_j < b^{d_j}$ pour tout $j = 1, \dots, s$.

Définition 2.13.

Soient t et m deux entiers tels que $0 \leq t \leq m$. Un **(t, m, s) -réseau en base b** est une suite finie $x = (x_1, \dots, x_{b^m})$ de b^m points de $[0, 1]^s$ telle que pour tout pavé élémentaire P_b en base b de volume $\lambda(P_b) = b^{t-m}$, le nombre, $A(P_b, x)$, de points de x qui appartiennent au pavé P_b , vérifie $A(P_b, x) = b^t$.

Une illustration du concept de (t, m, s) -réseau est donné par la figure 2.8. Sur cette figure on peut vérifier que pour les $b^m = 16$ points du $(0, 4, 2)$ -réseau, tout pavé de volume $b^{t-m} = 2^{-4}$ ne contient que $b^t = 1$ point.

Définition 2.14.

Soit un entier $t \geq 0$. Une **(t, s) -suite en base b** est une suite de point $x = (x_1, x_2, \dots)$ telle que pour toute paire d'entier $k \geq 0$ et $m \geq t$, la suite finie $(x_{kb^m}, \dots, x_{(k+1)b^m-1})$ est un (t, m, s) -réseau en base b .

Il est à noter que les suites de Sobol sont des (t, s) -suites en base $b = 2$ où le paramètre t dépend de s et est donné par le théorème 2.7. Les suites de Faure (définition 2.11), sont des $(0, s)$ -suites. Enfin, les suites de Van Der Corput (définition 2.7), quant à elles, sont des $(0, 1)$ -suites.

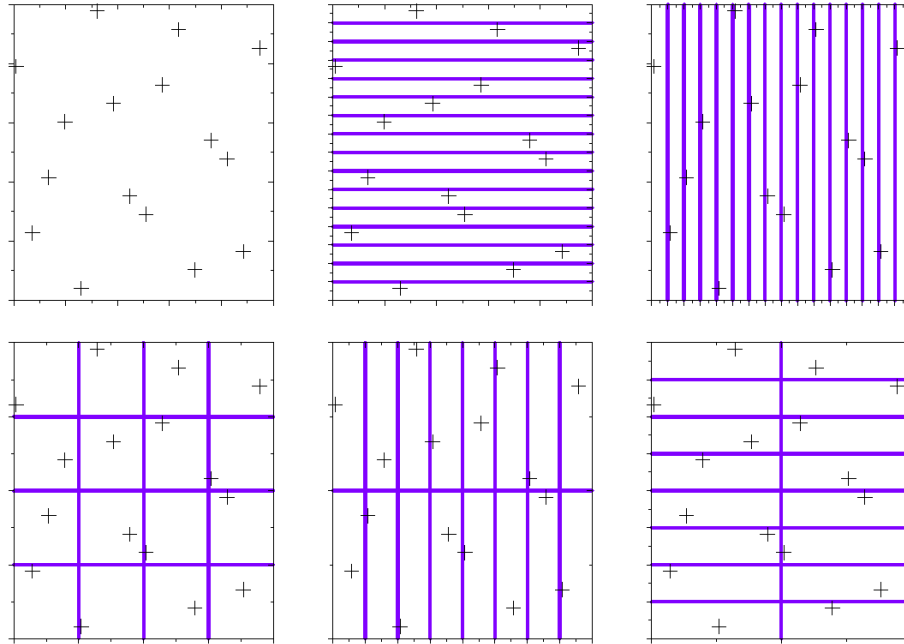


Figure 2.8 – Un $(0, 4, 2)$ -réseau en base $b = 2$ et des pavés de volume $b^{t-m} = 2^{-4}$.

Nous disposons d'un théorème garantissant l'équirépartition des (t, s) -suites, [Nie87].

Théorème 2.9.

Pour une (t, s) -suite $x = (x_1, x_2, \dots)$ en base b , on a

$$D_{\infty,*}(x) \leq C_{b,s,t} \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right)$$

où la constante $C_{b,s,t}$ est donnée par

$$C_{b,s,t} = \begin{cases} \frac{b^t}{s} \left(\frac{b-1}{2 \log b} \right)^s & \text{si } s = 2, \text{ ou si } b = 2 \text{ et } s \in \{3, 4\} \\ \frac{b^t}{s!} \frac{b-1}{2^{\lfloor b/2 \rfloor}} \left(\frac{\lfloor b/2 \rfloor}{\log b} \right)^s & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.18)$$

Ce théorème montre que pour m , s , et b fixés, plus t est petit et plus la qualité de répartition des points de la suite sera meilleure. En effet, pour m , s , et b fixés, la constante de majoration $C_{b,s,t}$ croît exponentiellement avec t . Ceci se comprend également à l'aide de la définition même de (t, m, s) -réseau. En effet, si le paramètre t est grand alors la contrainte sur le volume des pavés est beaucoup plus faible et la contrainte sur le nombre de points contenu dans le pavé également. Ceci peut alors entraîner des agglomérats de points et donc une mauvaise répartition. C'est la raison pour laquelle le paramètre t est souvent appelé paramètre de qualité. Des tables contenant la meilleure valeur de t qu'il est possible d'obtenir par différentes méthodes de construction sont données dans [MMN95], [CLM⁺99] et sur la page web <http://mint.sbg.ac.at/>. Cependant, le paramètre t n'est pas une garantie d'optimalité. En fait, la base b joue également un rôle important. Illustrons cette question avec les suites de Faure qui ne sont pas toujours optimales. Dans le cas des suites de Faure, la base b doit être supérieure à la dimension s . Niederreiter a montré dans [Nie87] qu'il n'existait pas de $(0, s)$ -suites en base b avec $b < s$. Par conséquent, lorsque la dimension augmente, même si $t = 0$, la constante donnée par (2.18) peut devenir supérieure à celle obtenue avec une valeur du paramètre t plus grande mais avec une base b plus petite. Cette idée est illustrée sur la figure 2.9. Comme on peut le constater, tant que la dimension s est inférieure ou égale à 5, la constante d'une $(0, s)$ -suite en base $b \geq s$ est inférieure à la constante d'une $(2, s)$ -suite en base $b = 3$. En revanche, lorsque la dimension est égale à 6, la constante de la $(0, s)$ -suite en base $b \geq s$ est supérieure à celle de la $(2, s)$ -suite en base 3.

De plus, d'après Cafilisch, Morokoff et Owen [CMO97], la notion de (t, m, s) -réseau devient pertinente pour $m > t$, c'est à dire pour un nombre de points $n \geq b^{t+1}$. Le nombre minimal de points n_{min} pour lequel la définition de (t, m, s) -réseau contraint les intervalles élémentaires à être de longueur inférieure à 1 (c'est-à-dire $d_j \geq 1$ pour $j = 1, \dots, s$ dans la définition 2.12) est $n_{min} = b^{t+s}$. Enfin, $n_{min} = b^{t+s}$ serait le nombre de points à partir duquel le régime asymptotique est atteint. Ce qui signifie qu'à partir de $n_{min} = b^{t+s}$, dans l'expression $(\log n)^s/n$ le numérateur $(\log n)^s$ peut être considéré comme négligeable par rapport à n , quelle que soit la dimension s . D'après [Nie87], la condition $s \leq b + 1$ est une condition nécessaire d'existence d'un $(0, m, s)$ -réseau en base b avec $m \geq 2$. Ainsi dans le cas de $(0, s)$ -suites, le nombre minimal de points vérifie $n_{min} \geq s^s$, ce qui devient impossible

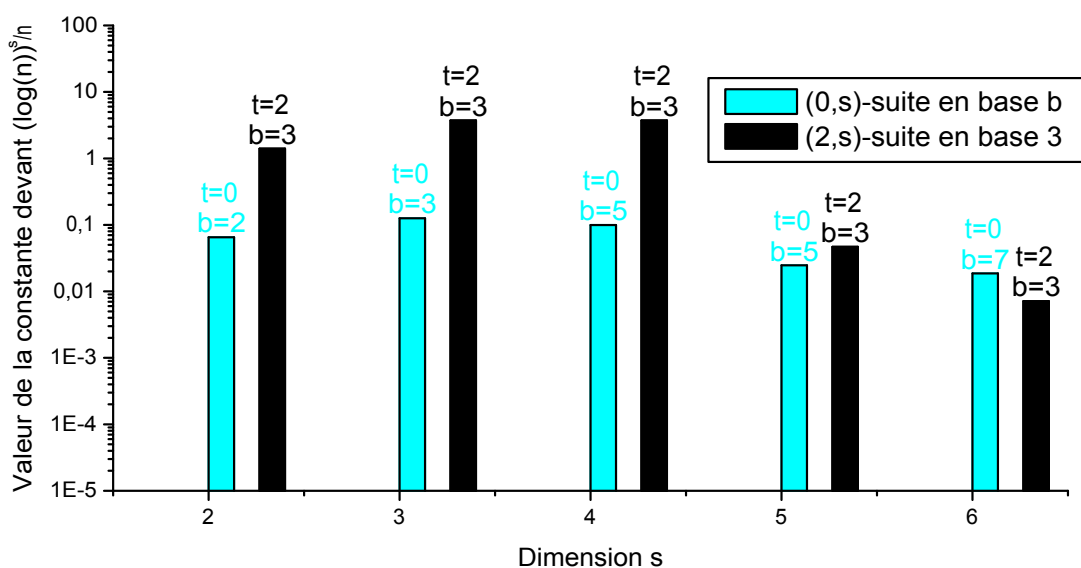


Figure 2.9 – Evolution de la constante de majoration de la discr pance infinie en fonction de la dimension s pour une $(0, s)$ -suite en base b et une $(2, s)$ -suite en base $b = 3$.

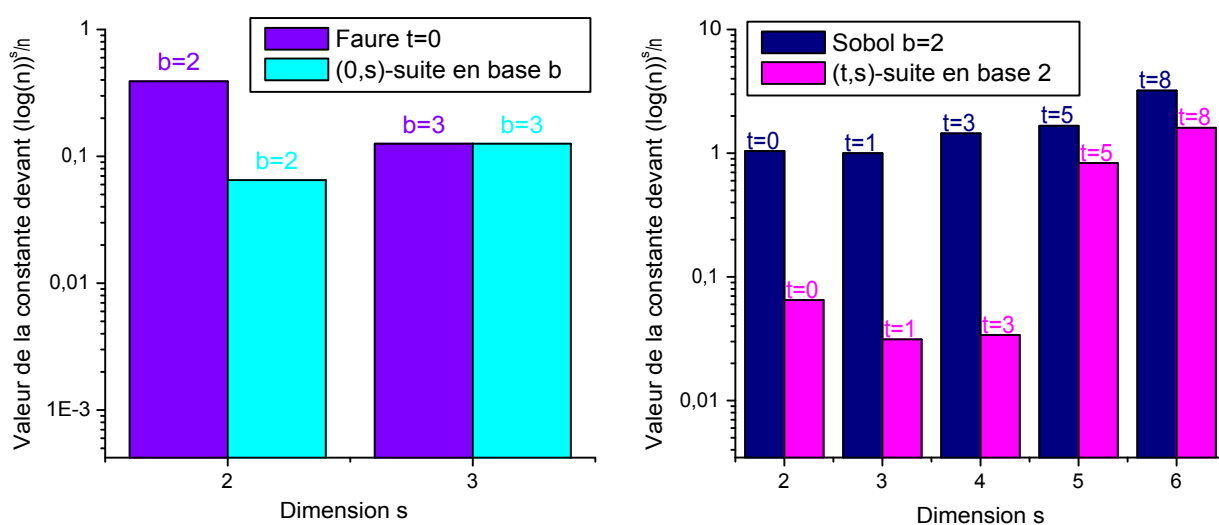


Figure 2.10 – Comparaison des constantes de majorations de la discr pance infinie donn es par les th or mes 2.8 et 2.7 par rapport   la constante donn e par le th or me 2.9 en fonction de la dimension s .

  atteindre en grande dimension. C'est pourquoi on s'int resse  galement aux suites dont le param tre t n'est pas nul mais pour lesquelles la base peut  tre choisie petite.

Dans certains cas, la majoration de la discr pance donn e par le th or me 2.9 est meilleure que celle des th or mes 2.8 et 2.7, comme l'illustre la figure 2.10. De plus, on peut trouver des majorations plus fines pour les (t, m, s) -r seaux dans [Nie87].

2.3.3.7 Les suites de Niederreiter

La m thode de construction des suites de Niederreiter consiste   obtenir une (t, s) -suite en base b [Nie88] telle que le param tre t soit le plus petit possible. Soient $s \geq 1$ et $b \geq 2$ des entiers donn s et $B = \{0, \dots, b - 1\}$. On choisit les  l ments suivants :

- (i) un anneau commutatif   b  l ments R .
- (ii) des bijections $\psi_r : B \rightarrow R$ pour $r = 0, 1, \dots$, telles que $\psi_r(0) = 0$ pour tout r suffisamment grand.
- (iii) des bijections $\lambda_{kj} : R \rightarrow B$ pour $j = 1, \dots, s$ et $k = 1, 2, \dots$, telles que $\lambda_{kj}(0) = 0$ pour $j = 1, \dots, s$ et pour tout k suffisamment grand.
- (iv) des  l ments $a_{kr}^{(j)} \in R$ pour $j = 1, \dots, s$, $k \geq 1$ et $r \geq 0$ tels que pour j et r fix s $a_{kr}^{(j)} = 0$ pour tout k suffisamment grand.

D finition 2.15.

Une **suite de Niederreiter** $N_b = (x_1, x_2, \dots)$ de dimension s en base b est donn e par

$$x_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} x_{ik}^j b^{-k} \quad \text{pour } j = 1, \dots, s \text{ et } i \geq 1$$

o 

$$x_{ik}^j = \lambda_{kj} \left(\sum_{r=0}^{\infty} a_{kr}^{(j)} \psi_r(c_r(i)) \right) \in B \quad \text{pour } j = 1, \dots, s, k \geq 1, i \geq 1$$

avec $c_r(i)$ les coefficients de la d composition de i dans la base b (2.15).

Puisque $\psi_r(0) = 0$ et $c_r(i) = 0$ pour tout r suffisamment grand, les sommes de la d finition ci-dessus sont finies. Le choix des bijections (ii) et (iii) peut  tre arbitraire. En revanche,

l'anneau R de (i) et les éléments $a_{kr}^{(j)}$ de (iv) doivent être choisis judicieusement pour que la suite N_b soit une (t, s) -suite en base b avec une faible valeur de t . Dans [Nie88] les coefficients $a_{kr}^{(j)}$ sont déterminés à l'aide d'un développement en série de Laurent. Dans [BFN92] l'implémentation d'un algorithme de génération de ces suites est présenté. Ces suites étant des (t, s) -suites, elles vérifient le théorème 2.9 et pour s et b fixés, b une puissance d'un nombre premier, la plus petite valeur de t que l'on puisse obtenir est 0 si $s \leq b$ et en $\mathcal{O}(s \log_b s)$ si $s > b$ [Nie88].

Discussion sur les majorations de la discrétance infinie

La majorité des suites à discrétance faible s'implémentent facilement et l'obtention des points est très rapide. Les résultats théoriques sur la majoration de la discrétance infinie, font apparaître des constantes C_s dont il est important de contrôler l'évolution quand la dimension s est grande. Toutes les suites à discrétance faible ont une majoration de la discrétance de la forme $C_s \frac{(\log n)^s}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^{s-1}}{n}\right)$. Ainsi la majoration décroît en $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right)$. Un simple calcul de dérivé montre que $\frac{(\log n)^s}{n}$ est croissant entre $n = 0$ et $n = e^s$. Ce comportement du majorant n'est pas cohérent avec l'idée que plus on a de points d'une suite à discrétance faible et plus la discrétance est petite. Cet argument heuristique laisse penser que ce majorant n'est pas une bonne mesure de performance de la suite finie, au moins tant que $n = \exp s$ n'a pas été atteint. En grande dimension, le nombre de points devient alors inaccessible. Par conséquent en grande dimension, la majoration ne donne aucune information sur la distribution des points. De plus, même lorsque le nombre de points nécessaire à la décroissance de la majoration de la discrétance infinie est atteint, les majorations restent très grossières. Et ceci se répercute sur l'estimation de l'erreur d'intégration. Néanmoins, faisons une comparaison des majorations de la discrétance infinie des différentes suites à discrétance faible. Le tableau 2.I présente les particularités de chacune des suites à discrétance faible vue dans cette section. En particulier, la dernière colonne présente la limite lorsque la dimension s tend vers l'infini de la constante de majoration C_s . La quatrième colonne contient la valeur du paramètre de qualité t lorsque la suite est une (t, s) -suite.

	dimension	base b	t	$\lim_{s \rightarrow \infty} C_s$
VD Corput	1	quelconque	0	
Halton	$s \geq 1$	plusieurs bases : entiers premiers entre eux		∞
Sobol	$s \geq 1$	2	approximativement linéaire avec la dimension	∞
Faure	$s \geq 1$	$b \geq s$, b premier	0	0
Niederreiter	$s \geq 1$	puissance d'un nombre premier	0 si $b \geq s$, $\mathcal{O}(s \log_b s)$ sinon	0

Tableau 2.I – Récapitulatif des propriétés des différentes suites à discrédance faible

2.3.4 La randomisation

L'étude de Morokoff et Caflisch [MC94] et celle de Kocis et Whiten [KW97] ont montré que les suites de Halton présentaient des irrégularités de répartition comme on peut le constater sur la figure 2.11. En effet, les suites de Van Der Corput en base b sont constituées de cycles de longueur b comme on peut le voir sur la figure 2.4. Une suite de Halton en dimension s étant constituée de s suites de Van Der Corput en bases b_1, \dots, b_s respectivement, les cycles de longueur b_1, \dots, b_s se retrouvent sur les projections uni-dimensionnelles correspondantes. Par exemple, pour une suite de Halton en dimension $s = 2$ en bases $b_1 = 107$ et $b_2 = 109$ (voire figure 2.11) le successeur d'un point s'obtient à l'aide d'une translation de vecteur $(\frac{1}{b_1} \bmod 1, \frac{1}{b_2} \bmod 1) = (\frac{1}{107} \bmod 1, \frac{1}{109} \bmod 1)$. On obtient ainsi une succession de diagonales qui se décalent progressivement. Visuellement, on s'aperçoit que certaines régions contiennent beaucoup moins de points que d'autres. Pour que toutes les régions du carré unité soient remplies de la même manière, il faut donc que le nombre de points soit un multiple de chacune des bases ce qui devient impossible à atteindre dès que la dimension augmente. A titre d'exemple, en dimension $s = 7$, en prenant pour bases les s premiers entiers premiers, il faut environ 500 000 points. Une première solution pour remédier à ce problème, donnée par Braaten et Weller [BW79], consiste à appliquer pour chaque suite de Van Der Corput (donc pour chaque base) une permutation identique à celle d'une suite de Van Der Corput généralisée (Définition 2.8). Là encore la discrédance de la suite obtenue est en $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right)$. D'autres permutations ont été proposées dans [Tuf96a], [Tuf97] et plus

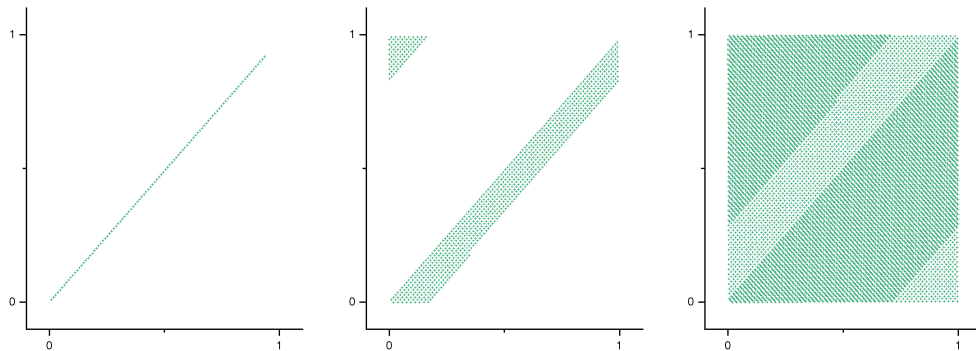


Figure 2.11 – Les 100, 1000 et 10000 premiers points de la suite de Halton en bases 107 et 109.

récemment dans [Ata04], [MC04], [VC06] et [FL09]. Ces méthodes sont appelées méthodes de randomisation ou de scrambling. De plus, ces techniques peuvent également être utilisées comme méthodes de réduction de variance dans le cadre de la méthode Monte Carlo [Tuf96b] et [Tuf97]. Ce problème a également été traité dans [MC94]. La discrédance obtenue est alors encore en $\mathcal{O}\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right)$.

Les problèmes de projections des suite de Halton se retrouvent pour les suites de Hammersley pour lesquelles on peut appliquer les même méthodes de randomisation.

Les suites de Sobol présentent également des irrégularités de répartition sur les projections d'ordre faible comme le montre la figure 2.12. Mais comme pour les suites de Halton, il existe des méthodes de randomisation permettant de palier ce problème [Owe98b].

Enfin, de même que pour les suites de Halton et de Sobol, les suites de Faure présentent des irrégularités de répartition sur les projections d'ordre faible. En particulier, on constate sur la figure 2.13, que la répartition des points sur les projections est mauvaise lorsque les coordonnées sont consécutives. Cette répartition est d'autant plus mauvaise que la base de la suite est élevée.

Là encore, il est possible d'appliquer une méthode de randomisation pour améliorer ces distributions. La méthode générale de Owen [Owe95] s'applique à tout (t, m, s) -réseaux et toutes (t, s) -suites. Cette méthode consiste à utiliser des permutations aléatoires. Plus précisément, supposons que l'on dispose d'une suite de Faure en base b , dont le $i^{\text{ème}}$ terme est

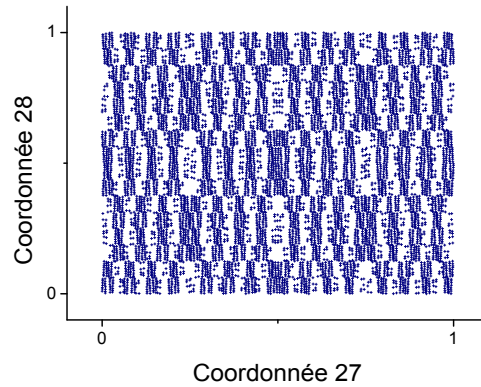
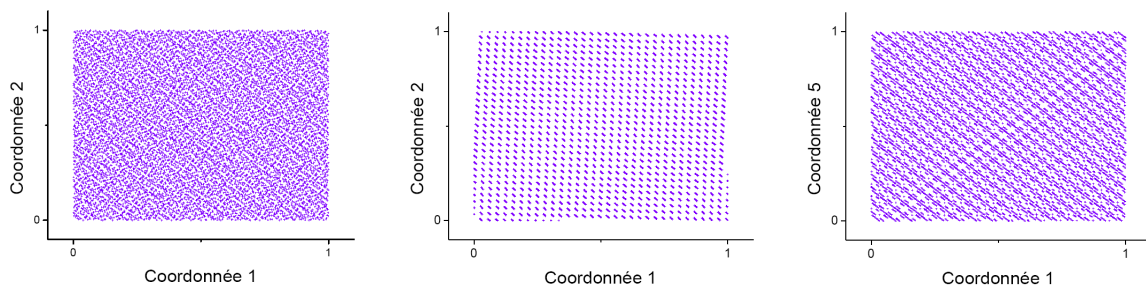


Figure 2.12 – Projection bi-dimensionnelle de 10000 points d’une suite de Sobol sur les coordonnées 27 et 28.



(a) $b = 3$, coordonnées 1 et 2 (b) $b = 31$, coordonnées 1 et 2 (c) $b = 31$, coordonnées 1 et 5

Figure 2.13 – Projection de 10000 points d’une suite de Faure en base $b = 3$ et en base $b = 31$ sur différentes coordonnées.

$x_i = (x_i^1, \dots, x_i^s)$. On écrit alors le développement dans la base b de chaque composante :

$$x_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} x_i^{j,k} b^{-k}$$

où $0 \leq x_i^{j,k} < b$, pour tout entier $i \geq 1$ et tout $j = 1, \dots, s$.

La version randomisée de la suite $x = (x_i)_{i=1,\dots,n}$ est la suite $r = (r_i)_{i=1,\dots,n}$ définie par :

$$r_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} r_i^{j,k} b^{-k}$$

où $r_i^{j,k}$ correspond à une permutation aléatoire de $x_i^{j,k}$. Nous expliquons maintenant comment obtenir $r_i^{j,k}$ à partir de $x_i^{j,k}$. Soit $i \in \{1, \dots, n\}$ et $j \in \{1, \dots, s\}$ fixés. On se donne une première permutation π_j de $\{0, \dots, b-1\}$ et on pose

$$r_i^{j,1} = \pi_j(x_i^{j,1}).$$

Ensuite, on effectue b tirages aléatoires uniformes indépendants d'une permutation $\pi_{j,x_i^{j,1}}$ de $\{0, \dots, b-1\}$ correspondant à chacune des b valeurs que peut prendre $x_i^{j,1}$. On définit le deuxième terme de r_i^j par

$$r_i^{j,2} = \pi_{j,x_i^{j,1}}(x_i^{j,2}).$$

De manière analogue, on tire b^2 permutations $\pi_{j,x_i^{j,1},x_i^{j,2}}$ de $\{0, \dots, b-1\}$ de manière aléatoire uniforme indépendantes correspondant aux b^2 valeurs que peut prendre le couple $(x_i^{j,1}; x_i^{j,2})$ et on pose

$$r_i^{j,3} = \pi_{j,x_i^{j,1},x_i^{j,2}}(x_i^{j,3})$$

etc... On a ainsi défini l'application σ_j , de $[0, 1]$ sur lui-même, qui associe à la $j^{\text{ème}}$ composante x_i^j du point x_i la valeur r_i^j . On choisit alors de la même manière s applications globalement indépendantes $\sigma_1, \dots, \sigma_s$. Enfin, on applique $\sigma_1, \dots, \sigma_s$ à tous les points x_i , $i = 1, \dots, n$. Dans le cas où b est un entier premier, ce qui est le cas pour les suites de Faure, Matousek [Mat98] propose de restreindre le choix des permutations ce qui limite le nombre de permutations à stocker pour leur implémentation. En particulier il propose de prendre des permutations linéaires, c'est-à-dire de la forme $\pi_k(x_i^{jk}) = h_k x_i^{jk} + g_k$, où $h_k \in \{1, 2, \dots, b-1\}$ et $g_k \in \{0, 1, \dots, b-1\}$ et l'arithmétique s'effectue modulo la base b . Faure et Tezuka [TF03] ont proposé deux autres méthodes de scrambling très similaires à celle de Matousek permettant de restreindre encore le choix des permutations. Les permutations sont linéaires mais ayant en plus la propriété d' i -binomialité. Plus précisément, l'une des mé-

thodes proposée par Faure et Tezuka consiste à définir pour chaque j , une permutation $\pi_{x_i^{j,1}, \dots, x_i^{j,k-1}}(x_i^{j,k}) = \sum_{l=1}^k h_{k-l+1} x_i^{j,l} + g_k \bmod b$, où les h_l sont les éléments de la $j^{\text{ème}}$ colonne d'une matrice triangulaire inférieure 0-binomiale (c'est-à-dire de Toeplitz) dont les éléments sont dans $\{0, \dots, b-1\}$, choisie de manière aléatoire parmi l'ensemble des matrices candidates. Toutes ces méthodes permettent d'améliorer la qualité des projections des points sur des sous-espaces de petite dimension, comme on peut le constater sur la figure 2.14. D'autre

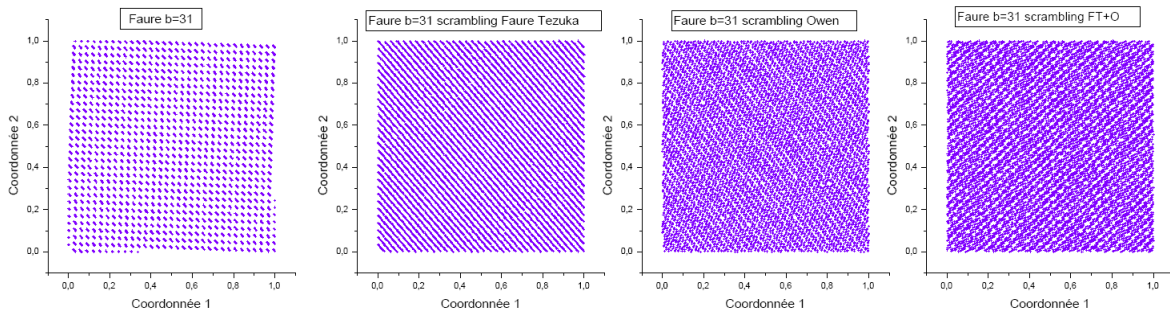


Figure 2.14 – Projection de 10000 points d'une suite de Faure en base $b = 31$ randomisée à l'aide de la méthode de Tezuka-Faure, puis celle de Owen puis les deux, sur les 2 premières coordonnées.

part, ces méthodes permettent de conserver la discrétion en $\mathcal{O}(\frac{(\log n)^s}{n})$. Plus précisément, un (t, m, s) -réseau est encore un (t, m, s) -réseau après randomisation. Cependant, l'amélioration apportée par le scrambling n'est pas toujours suffisante, comme on peut le voir sur la figure 2.15.

2.3.5 Algorithmes d'optimisation pour la discrétion

La méthode quasi-Monte Carlo utilise des suites dont la discrétion est asymptotiquement plus faible qu'une suite de points aléatoires uniformes, dans le but d'obtenir une erreur d'estimation plus faible. Ainsi l'utilisation d'algorithmes stochastiques d'optimisation visant à minimiser la discrétion semble pouvoir offrir de meilleures performances que les suites à discrétion faible. Ces algorithmes partent d'un ensemble de points initial qui sera modifié, par des échanges de points, jusqu'à obtenir un ensemble de points proche de la suite finie

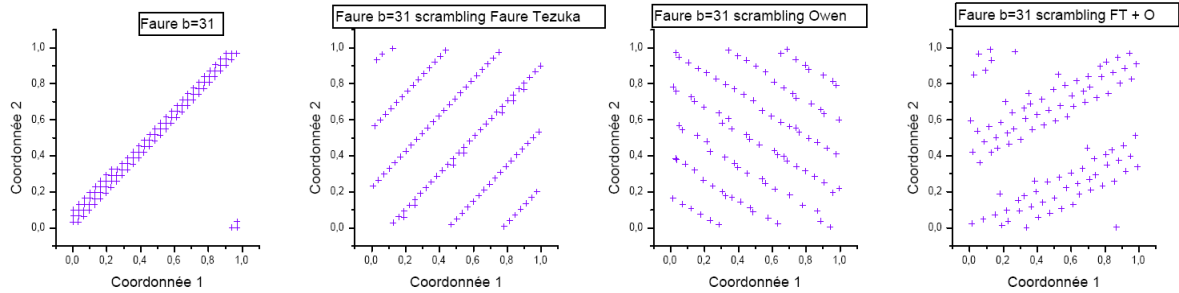


Figure 2.15 – Projection de 100 points d’une suite de Faure en base $b = 31$ randomisée à l’aide de la méthode de Tezuka-Faure, puis celle de Owen puis les deux, sur les 2 premières coordonnées.

optimale par rapport à la discrédance. Ces algorithmes sont aussi parfois appelés algorithmes d’échanges.

Algorithme 2.1 Algorithme d’échange simple

Initialisation : Soit une suite finie de n points $x = (x_1, \dots, x_n)$ en dimension s

Calculer la discrédance carrée moyenne associée $D_{L_2, *}(x)$

tant que la condition d’arrêt n’est pas vérifiée **faire**

 choisir un point x_i de la suite finie x

 simuler un point z_i de loi uniforme dans $[0, 1]^s$

 Calculer la discrédance $D_{L_2, *}(z)$ de la suite finie $z = (x_1, \dots, x_{i-1}, z_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$

si $D_{L_2, *}(x) > D_{L_2, *}(z)$ **alors**

 remplacer x_i par z_i

fin si

fin tant que

La procédure la plus simple est décrite dans l’algorithme 2.1. La suite finie de points initiale peut être quelconque. Dans l’algorithme 2.1, le choix des points selon une loi uniforme peut être remplacé par les points d’une suite à discrédance faible ou d’un hypercube latin. La discrédance choisie ici est la discrédance carrée moyenne, mais il est possible de prendre une autre discrédance. En fonction de l’objectif d’utilisation des points (exploration ou intégration) il est possible d’utiliser d’autre critère que la discrédance, comme un critère fondé sur la distance entre les points ou l’entropie [JF09]. La condition d’arrêt peut porter sur différents paramètres, comme le nombre d’itérations ou bien la valeur de discrédance à atteindre. Bien que ces algorithmes permettent d’obtenir une suite finie de points avec une

très faible discrédance, leur temps d'exécution peut vite devenir un obstacle à leur utilisation. Ainsi, Fang et Hickernell [FH95] proposent de restreindre le choix des points. Plus précisément, ils cherchent à trouver parmi une classe de plans, celui qui a la plus faible discrédance. Les plans parmi lesquels ils cherchent celui de plus faible discrédance sont les plans U-type.

Définition 2.16.

Un **plan U-type** à n expériences et à s facteurs, chacun ayant $nbNiv_1, \dots, nbNiv_s$ niveaux, est une matrice $n \times s$ telle que les $nbNiv_j$ niveaux dans la colonne j apparaissent un même nombre de fois. Les niveaux sont notés par des entiers compris entre 1 et $nbNiv_j$.

Fang et Hickernell [FH95] prennent des plans U-type tels que $nbNiv_j = n$ pour $j = 1, \dots, s$. Les niveaux sont alors les entiers compris entre 1 et $nbNiv_j = n$. On se ramène ensuite à des points de $[0, 1]^s$ en prenant pour le $i^{\text{ème}}$ point $x_i, i = 1, \dots, n$:

$$x_i = \left(\frac{2 \text{niveau}_1^i - 1}{2n}, \dots, \frac{2 \text{niveau}_s^i - 1}{2n} \right)$$

où niveau_j^i est le niveau de la $j^{\text{ème}}$ variable pour l'expérience i . L'ensemble des plans U-type tels que $nbNiv_j = n$ pour $j = 1, \dots, s$ est fini. C'est la raison pour laquelle la plupart des algorithmes d'optimisation, utilisés pour la minimisation de la discrédance, restreignent le choix des plans à l'ensemble des plans U-type ou des plans de type hypercube latins. La comparaison ne se fait plus sur l'échange d'un point avec un autre mais l'échange d'un plan avec un autre. En d'autres termes, l'algorithme cherche le plan U-type de plus faible discrédance parmi l'ensemble des plans U-type tels que $nbNiv_j = n$ pour $j = 1, \dots, s$. La règle d'acceptation de l'algorithme 2.1, correspond à une recherche locale. Si la discrédance que l'on cherche à minimiser présente plusieurs minima locaux, l'algorithme risque de ne renvoyer qu'un de ces minima locaux et d'être loin du minimum global. Une alternative consiste à introduire un seuil d'acceptation [WF98], [FM01][FMW02], [FLW03], [FTY05] et [FMTW06]. On parle alors d'algorithme à seuil. Plus précisément, soit $T \geq 0$ un réel. Si la différence entre la discrédance du nouveau plan et celle du plan courant est inférieure au seuil T , on accepte le nouveau plan, sinon, on conserve le plan courant. Le seuil T décroît avec le nombre d'itérations. Dans le même esprit, on trouve l'algorithme de recuit simulé [MM95].

Notons ΔD la différence entre la discrédance du nouveau plan et celle du plan courant. Si

$$\exp\left(-\frac{\Delta D}{T}\right) \geq z$$

où z suit une loi uniforme $\mathcal{U}([0, 1])$, alors on accepte le nouveau plan, sinon on conserve le plan courant. De même que pour l'algorithme précédent, le seuil T décroît avec le nombre d'itérations. Enfin, il est possible de combiner l'algorithme de recuit simulé à celui à seuil [JCS05]. Il s'agit d'un algorithme évolutionniste. Cet algorithme consiste à accepter le nouveau plan si $\Delta D < 0$, sinon, on accepte le nouveau plan si $\Delta D < Tz$, où z suit une loi uniforme sur $[0, 1]$.

Discussion sur les algorithmes d'optimisation

Contrairement aux suites à discrédances faible de la section 2.3.3, les suites finies issues de ces algorithmes ne sont pas déterministes. De plus, leur caractère aléatoire évite un comportement cyclique. Cependant, même en réduisant l'espace dans lequel on cherche le plan optimal, leur temps d'exécution peut devenir un obstacle à leur utilisation dès que la dimension et le nombre de points est grand. Enfin, ces algorithmes nécessitent de connaître le nombre de points à l'avance. En effet, une fois que l'on dispose d'un plan à discrédance faible de n points, si on souhaite ajouter un point, alors il sera nécessaire de relancer l'algorithme sur les $n + 1$ points. Par conséquent, il faudra évaluer la fonction à nouveau sur les $n + 1$ points.

2.4 Conclusion

En l'absence d'information sur la régularité de la fonction, la méthode Monte Carlo s'avère être une méthode fréquemment employée. Toutefois sa vitesse de convergence est relativement lente. Nous avons mis en avant dans ce chapitre qu'il était possible de la réduire d'un facteur constant grâce aux méthodes dites de réduction de variance comme l'échantillonnage par hypercube latin. Cependant la vitesse de convergence reste en $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$. La méthode de quasi-Monte Carlo offre de ce point de vue une amélioration considérable grâce

à une vitesse de convergence théorique, donnée par la borne de Koksma-Hlawka, en $\mathcal{O}\frac{(\log n)^s}{n}$. La borne de Koksma-Hlawka dépend de la discrétance infinie de la suite utilisée ainsi que de la variation au sens de Hardy-Krause de la fonction. La complexité du calcul de ces deux quantités rend la borne inutilisable en pratique. Par ailleurs, Morokoff et Caflisch [MC94] ont mis en évidence la faible contribution de la variation dans l'erreur d'intégration. C'est pourquoi on utilise en général une majoration de la discrétance pour prédire le comportement de l'erreur d'intégration. Néanmoins, la majoration obtenue dépend de la dimension. En dimension élevée, avec un nombre de points restreint, la comparaison des majorations de l'erreur d'intégration pour la méthode MC et QMC laissent penser que la méthode de Monte Carlo est plus performante, alors que plusieurs études en grande dimension tendent à montrer le contraire. L'utilisation, dans ces études, de fonctions ne dépendant en réalité que d'un faible nombre de variables pourrait expliquer cette constatation. Il existe des variantes de cette majoration faisant appel à des quantités plus simples à calculer, telles que la discrétance en norme L_2 -étoile. Cependant, ces quantités ne tiennent pas compte des spécificités de la fonction d'intérêt, telles que l'importance relative des variables. Ainsi, hormis la variation, aucune caractéristique de la fonction n'intervient dans la majoration de l'erreur d'intégration. C'est pourquoi la discrétance L_2 -étoile pondérée semble être une bonne alternative à la discrétance en norme L_2 -étoile pour la majoration de l'erreur d'intégration. La difficulté de cette discrétance réside dans le choix des poids. Une pondération par les indices de Sobol (1.11) permettrait d'obtenir une discrétance adaptée à la fonction d'intérêt. Cependant en dimension élevée, l'estimation de tous les indices de Sobol est irréalisable.

De plus, nous avons mis en évidence dans ce chapitre que les suites à discrétance faible utilisées pour la méthode QMC, présentent des irrégularités de répartition pour certaines projections sur des espaces de dimension faible. Bien que les méthodes dites de scrambling permettent d'améliorer la répartition sur les projections, l'amélioration n'est pas toujours suffisante pour combler les lacunes de la répartition. Une alternative au scrambling consiste à utiliser des algorithmes d'échange. Cependant, ces algorithmes sont souvent très long en temps d'exécution et ne permettent pas l'ajout de points.

Deuxième partie

Intégration numérique adaptée à une fonction d'intérêt

CHAPITRE 3

ANALYSE DE SENSIBILITÉ ET DIMENSION EFFECTIVE

Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, il est nécessaire de réduire la dimension du problème avant d'utiliser la méthode quasi-Monte Carlo. La réduction de dimension consiste dans notre cas à fixer les variables non influentes à une valeur quelconque. Il s'agit donc, dans un premier temps, d'évaluer la significativité des variables pour notre fonction d'intérêt puis d'identifier les variables les plus significatives et de fixer leur nombre. Pour ce faire, il existe plusieurs méthodes. Ces méthodes ont été détaillées dans le chapitre 1. Nous rappelons que chacune de ces méthodes nécessite des hypothèses non vérifiées dans notre cas. C'est la raison pour laquelle nous avons cherché un compromis permettant de connaître les variables significatives sans avoir à faire d'hypothèses trop contraignantes. En particulier, nous avons souhaité pouvoir prendre en compte des variables corrélées et éviter de supposer que la réponse suit une loi normale. Nous précisons donc dans la première section de ce chapitre en quoi consiste ce compromis. Dans la deuxième section de ce chapitre, nous présentons quelques résultats numériques sur le classement des variables ainsi obtenu.

3.1 Méthode de calcul des indices de Sobol à partir d'un plan d'expériences factoriel fractionnaire à deux niveaux

Nous reprenons dans ce chapitre les notations introduites dans le chapitre 1. En particulier, nous rappelons que, dans ce chapitre, la fonction d'intérêt est la sortie du code numérique. Par conséquent nous désignerons la fonction d'intérêt par f .

Notre approche consiste à estimer les indices de Sobol à partir d'un plan factoriel fractionnaire dans le but d'évaluer la significativité de chacune des variables à moindre coût.

Les facteurs définis d'un plan factoriel fractionnaire sont déduits des facteurs de base, ils ne peuvent donc pas être considérés comme indépendants globalement. Nous pouvons ainsi constater que les hypothèses de validité de l'ANOVA fonctionnelle ne sont pas vérifiées lorsqu'on utilise les points d'un plan factoriel fractionnaire. Pour remédier à cette incompatibilité, nous proposons dans cette section une décomposition similaire à celle de l'ANOVA fonctionnelle mais pour laquelle les hypothèses de validité sont vérifiées dans le cadre des plans d'expériences factoriels fractionnaires. Pour cela, nous considérons un plan factoriel fractionnaire 2^{s-p_1} . Contrairement à l'approche par plan d'expériences, les facteurs sont ici considérés comme des variables aléatoires qui ne peuvent prendre que deux valeurs. On choisit parmi les s facteurs, p_1 facteurs de bases indépendants : X^j définis sur $\{-1, 1\}^{p_1}$, $1 \leq j \leq p_1$. Ces p_1 facteurs de base sont les fonctions coordonnées correspondantes.

Les p_2 facteurs restants X^j , $p_1 + 1 \leq j \leq s$ sont définis par des sous-ensembles d'indices $u \subseteq \{1, \dots, p_1\}$. Plus précisément, pour tout indice j , $p_1 + 1 \leq j \leq s$, il existe un sous-ensemble d'indices $u_j \subseteq \{1, \dots, p_1\}$ tel que $X^j = \prod_{l \in u_j} X^l$.

Pour tout sous-ensemble d'indices $u \subseteq \{1, \dots, s\}$, on définit

$$\begin{aligned} X^u : \{-1, 1\}^{p_1} &\rightarrow \{-1, 1\} \\ \omega &\mapsto X^u(\omega) = \prod_{l \in u} X^l(\omega). \end{aligned}$$

Par convention, nous posons $X^\emptyset \equiv 1$. Dans ce cadre, on considère que la fonction f est définie sur $\{-1, 1\}^s$. Le résultat d'une expérience $X(\omega) = (X^1(\omega), \dots, X^s(\omega))$ est donné par la fonction à valeurs réelles $Y(\omega) = f(X(\omega))$.

L'espace $\Omega = \{-1, 1\}^{p_1}$ est muni de la mesure $(\frac{1}{2}(\delta_1 \oplus \delta_{-1}))^{\otimes p_1}$ où δ_1 et δ_{-1} sont les masses de Dirac en 1 et -1 respectivement, de manière à utiliser un formalisme similaire à celui de l'ANOVA fonctionnelle.

L'utilisation de cette mesure revient à supposer que chaque facteur de base est une variable aléatoire de Bernoulli sur $\{-1; 1\}$. De plus, nous pouvons noter que, avec cette mesure, seuls les facteurs de base sont indépendants.

En reprenant la définition des fonctions $\alpha_u((X^j)_{j \in u})$ donnée par (1.9) :

$$\begin{cases} \alpha_\emptyset & = E(Y) \\ \alpha_u((X^j)_{j \in u}) & = E(Y \mid (X^j)_{j \in u}) - \sum_{v \subsetneq u} \alpha_v((X^j)_{j \in v}) \quad \forall u \subseteq \{1, \dots, s\}, \end{cases}$$

la proposition suivante garantit l'existence d'une décomposition de la fonction f similaire à la décomposition (1.8) :

Proposition 3.1.

Soit $n = 2^{p_1}$, $\log_2(p_2 + 1) < p_1 < s$. On choisit $(u_i)_{i=1, \dots, n}$ n sous-ensembles d'indices de $\{1, \dots, s\}$ tels que $\forall i \neq l, X^{u_i} \neq X^{u_l}$, alors f peut se décomposer sous la forme :

$$f(X^1, \dots, X^s) = \sum_{i=1}^n \alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}) \quad (3.1)$$

où $\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i})$ sont deux à deux indépendantes.

De plus, $\forall u \subseteq \{1, \dots, s\}$, si on note $\beta_u = E(X^u Y)$ et $\beta_\emptyset = E(Y)$, alors

$$\alpha_u((X^j)_{j \in u}) = \beta_u X^u.$$

Preuve de la proposition 3.1. :

Soit u un sous-ensemble de $\{1, \dots, s\}$.

On suppose que le cardinal de u est $|u| = k \leq s$. On peut montrer par induction sur le cardinal de u que

$$\alpha_u((x^j)_{j \in u}) = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{k-|v|} \frac{2^{|v|}}{|\Omega|} \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^j(\omega) = x^j \quad \forall j \in v}} Y(\omega).$$

D'une part, en groupant les termes en fonction du nombre de j tel que $X_j = -x_j$, on obtient

$$\begin{aligned} \alpha_u((x^j)_{j \in u}) &= \sum_{v \subseteq u} \left(\sum_{w \subseteq v} \frac{(-1)^{k-|w|}}{2^{p_1-|w|}} \right) \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^j(\omega)=x^j \ \forall j \in v \\ X^j(\omega)=-x^j \ \forall j \in u \setminus v}} Y(\omega) \\ &= \sum_{v \subseteq u} \left(\sum_{t=0}^{|v|} C_{|v|}^t \frac{(-1)^{k-t}}{2^{p_1-t}} \right) \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^j(\omega)=x^j \ \forall j \in v \\ X^j(\omega)=-x^j \ \forall j \in u \setminus v}} Y(\omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_u((x^j)_{j \in u}) &= \sum_{v \subseteq u} \left(\frac{(-1)^{k-|v|}}{2^{p_1-|v|}} \frac{1}{2^{|v|}} \right) \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^j(\omega)=x^j \ \forall j \in v \\ X^j(\omega)=-x^j \ \forall j \in u \setminus v}} Y(\omega) \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \sum_{v \subseteq u} (-1)^{k-|v|} \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^j(\omega)=x^j \ \forall j \in v \\ X^j(\omega)=-x^j \ \forall j \in u \setminus v}} Y(\omega). \end{aligned}$$

Maintenant, si $k-|v|$ est pair, alors $X^u = \prod_{j \in u} x^j$, sinon, $X^u = -\prod_{j \in u} x^j$. Donc, pour $x = \prod_{j \in u} x^j$,

$$\alpha_u((x^j)_{j \in u}) = \frac{1}{|\Omega|} \left(\sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=x}} Y(\omega) - \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=-x}} Y(\omega) \right).$$

D'autre part, pour $x = \prod_{j \in u} x^j$

$$\begin{aligned} \beta_u &= E(X^u Y) \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \sum_{\omega \in \Omega} X^u(\omega) Y(\omega) \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \left(\sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=x}} x Y(\omega) + \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=-x}} -x Y(\omega) \right). \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} x\beta_u &= \frac{1}{|\Omega|} \left(\sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=x}} Y(\omega) - \sum_{\substack{\omega \in \Omega \\ X^u(\omega)=-x}} Y(\omega) \right) \\ &= \alpha_u((x^j)_{j \in u}). \end{aligned}$$

On a donc montré que l'égalité $\alpha_u((X^j)_{j \in u}) = \beta_u X^u$ est vérifiée pour tout $u \subseteq \{1, \dots, s\}$.

Nous allons montrer maintenant que les fonctions $\alpha_u((X^j)_{j \in u})$ sont deux à deux indépendantes. Il est connu que le produit de variables aléatoires de Bernoulli centrées indépendantes est une variable aléatoire de Bernoulli centrée. En particulier, si $k_1, \dots, k_t \in \{1, \dots, p_1\}$ sont distincts,

$$E\left(\prod_{r=1}^t X^{k_r}\right) = 0.$$

Soient $u_0, v_0 \subseteq \{1, \dots, s\}$. Alors, il existe $u, v \subseteq \{1, \dots, p_1\}$ tels que $X^u X^v = X^{u_0} X^{v_0}$. Soient $u_0, v_0 \subseteq \{1, \dots, s\}$, tels que u et v soient distincts. On a $E(X^{u_0} X^{v_0}) = 0$. Or, nous savons que si deux variables de Bernoulli Y_1, Y_2 sont centrées, alors $E(Y_1 Y_2) = 0$ implique que Y_1 et Y_2 sont indépendantes.

Nous avons donc montré l'indépendance deux à deux des facteurs et des interactions qui ne sont pas aliasées. La forme des fonctions $\alpha_u((X^j)_{j \in u})$, implique leur indépendance deux à

deux.

Il reste à montrer la décomposition (3.1). Le vecteur $(Y(\omega))_{\omega \in \Omega}$ appartient à $\mathbb{R}^{2^{p_1}}$, et $\forall i = 1, \dots, n$ $(\alpha_{u_i}((X^j(\omega))_{j \in u_i}))_{\omega \in \Omega}$ sont aussi dans $\mathbb{R}^{2^{p_1}}$.

Par conséquent, il suffit de montrer que le vecteur $(Y(\omega))_{\omega \in \Omega}$ appartient à l'espace vectoriel engendré par $(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}))_{i=1, \dots, n}$.

Soient $i_1, i_2 \in \{1, \dots, n\}$ distincts.

$$\alpha_{u_{i_1}}((X^j)_{j \in u_{i_1}}) = \beta_{u_{i_1}} X^{u_{i_1}} \text{ et } \alpha_{u_{i_2}}((X^j)_{j \in u_{i_2}}) = \beta_{u_{i_2}} X^{u_{i_2}}.$$

Par construction du plan factoriel fractionnaire, $X^{u_{i_1}}$ et $X^{u_{i_2}}$ sont orthogonaux.

Donc, $(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}))_{i=1, \dots, n}$ constitue une base de l'espace vectoriel $\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{2^{p_1}}$. \square

Notons que la proposition 3.1 suppose que la fonction f est définie sur $\{-1; 1\}$. De plus le résultat est vrai pour toute fonction f et pour tout entier p_1 tel que $\log_2(p_2 + 1) < p_1 < s$.

Remarque 3.1.

On peut remarquer que si deux interactions X^u et X^v , codées par les sous-ensembles d'indices u et v de $\{1, \dots, s\}$, $u \neq v$, sont aliasées (c'est-à-dire tels que $X^u = X^v$), alors $\alpha_u = \alpha_v$. Ce qui signifie que chaque fonction α_{u_i} , pour $i = 1, \dots, n$, est définie pour la classe d'équivalence des interactions aliasées à X^{u_i} .

Remarque 3.2.

Une fois que l'on a choisi les u_i , $i = 1, \dots, n$, la décomposition (3.1) est unique. Un choix simple pour les u_i , $i = 1, \dots, n$, serait les 2^{p_1} sous-ensembles de $\{1, \dots, p_1\}$. Mais il est plus adapté de choisir 2^{p_1} interactions entre les facteurs de base et les facteurs définis de petite longueur. En effet, si on suppose que les interactions d'ordre élevé sont négligeables, il y a plus de chance qu'une interaction entre deux facteurs soit plus importante que son alias à plus de facteurs.

Remarque 3.3.

Nous avons spécifié au chapitre 2 que la méthode d'intégration numérique quasi-Monte Carlo considèrerait une fonction définie sur $[0, 1]^s$. Ici nous considérons l'espace $\{-1, 1\}^s$. Il est possible de se ramener à l'espace $\{0, 1\}^s$ par un simple changement de variable. Plus précisément, chaque facteur de base X^j , $j = 1, \dots, p_1$, serait la fonction coordonnée définie sur $\{0, 1\}^{p_1}$, chaque facteur restant X^j , $j = p_1 + 1, \dots, s$ serait défini par un sous-ensemble d'indices $u_j \subseteq \{1, \dots, s\}$ de sorte que $X^j = \frac{1}{2}(\prod_{l \in u_j} (2X^l - 1) + 1)$, pour tout sous-ensemble d'indices $u \subseteq \{1, \dots, s\}$, nous pourrions définir X^u par $X^u = \frac{1}{2}(\prod_{l \in u} (2X^l - 1) + 1)$ et enfin, l'ensemble $\{0, 1\}^s$ serait muni de la mesure $(\frac{1}{2}(\delta_0 \oplus \delta_1))^{\otimes p_1}$. Dans ce cadre, la décomposition (3.1) est vérifiée et pour $\beta_u = E((2X^u - 1)Y)$, nous avons $\alpha_u((X^j)_{j \in u}) = \beta_u(2X^u - 1)$.

De la décomposition (3.1) et de l'indépendance deux à deux des fonctions $\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i})$, on peut décomposer la variance en la somme des variances :

$$\text{Var}(Y) = \sum_{i=1}^n \text{Var}(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i})).$$

De plus, le choix de la mesure produit $(\frac{1}{2}(\delta_1 \oplus \delta_{-1}))^{\otimes p_1}$, nous donne

$$\forall i = 1, \dots, n \quad \text{Var}(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i})) = \beta_{u_i}^2.$$

Ainsi, on peut facilement évaluer la significativité de chaque X^{u_i} sur la réponse à l'aide des indices de Sobol correspondant :

$$IS_{u_i}^{frac} = \frac{\text{Var}(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}))}{\text{Var}(Y)}. \quad (3.2)$$

Ainsi, nous utilisons un plan d'expériences factoriel fractionnaire à 2 niveaux et nous effectuons une ANOVA fonctionnelle uniquement sur les facteurs de base. Pour plus de lisibilité, nous appellerons dans la suite les indices définis par (3.2) les indices de Sobol fractionnaires afin de mettre en avant l'utilisation du plan factoriel fractionnaire.

Il est à noter que, d'une part, contrairement à la décomposition de l'ANOVA fonctionnelle

classique (1.8) qui comporte 2^s termes, la décomposition (3.1) ne contient que 2^{p_1} termes. Et, en raison de la remarque 3.1, chaque indice de Sobol fractionnaire $IS_{u_i^{frac}}$ est défini pour la classe d'équivalence des interactions aliasées à X^{u_i} . D'autre part, contrairement à la significativité des variables donnée par la statistique de Fisher, les indices de Sobol fractionnaires ne dépendent pas d'un choix a priori des variables et interactions du modèle.

Enfin, si on suppose que les interactions d'ordre élevé sont négligeables, on peut écrire :

$$f(X^1, \dots, X^s) = \sum_{i=1}^k \alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}) + \varepsilon \quad (3.3)$$

où $k \leq n$ et ε est un terme d'erreur qui est petit si la proportion de variance expliquée par les variables et interactions X^{u_i} , pour $i = 1, \dots, k$ est élevée.

Dans ce contexte, on peut adapter la définition de dimension effective au sens de la troncature :

Définition 3.1.

Avec un plan factoriel fractionnaire de résolution supérieure ou égale à *III*, la **dimension effective** peut être définie comme le plus petit entier d tel que : $\exists H \subseteq \{u_i, i = 1, \dots, n$ tel que $|u_i| = 1\}$ de cardinal d tel que

$$\sum_{u_i \in H} \sum_{\substack{u_j \supseteq u_i \\ |u_j| \leq \lfloor \frac{\text{resolution}-1}{2} \rfloor}} \frac{\text{Var}(\alpha_{u_j}((X^k)_{k \in u_j}))}{|u_j|} \geq p \text{Var}(f(X)) \quad (3.4)$$

où $p \in [0, 1]$ représente la proportion de variance que l'on souhaite expliquer et *resolution* est la résolution du plan utilisé.

Contrairement à la définition de dimension effective au sens de la troncature, l'évaluation (3.4) ne se fait pas sur l'ensemble des parties de $\{1, \dots, s\}$ mais sur un sous-ensemble. De plus, en raison d'un formalisme différent, afin de ne pas compter plusieurs fois la même variance, il est nécessaire de diviser chaque variance des fonctions $\alpha_{u_j}((X^k)_{k \in u_j})$ par le cardinal du sous-ensemble u_j .

3.2 Comparaisons numériques entre indices de Sobol et indices de Sobol fractionnaires

A partir des résultats d'un plan d'expériences factoriel fractionnaire à deux niveaux, nous avons défini les indices de Sobol fractionnaires que nous souhaitons utiliser comme estimation des indice de Sobol. Toutefois, nous ne disposons pas de preuve théorique de la convergence des indices de Sobol fractionnaires vers les indices de Sobol lorsque le nombre de niveaux tend vers l'infini. De plus, ne considérer que deux niveaux par variable est une discrétisation très brutale. Enfin, l'utilisation d'un plan factoriel fractionnaire introduit des confusions d'effets dans le modèle de régression (3.1). On est alors en droit de se demander si les indices de Sobol fractionnaires peuvent être considéré comme de bons estimateurs des indices de Sobol. C'est pourquoi dans cette section nous nous proposons de comparer la valeur des indices de Sobol fractionnaires pour différentes fonctions tests à la valeur exacte des indices de Sobol (1.11). Nous comparons également ces valeurs aux estimations des indices de Sobol par les méthodes FAST et Sobol. Les deux premières fonctions test sont issues de [SCS00].

3.2.1 Cas d'un test linéaire

La première fonction test est un cas de fonction linéaire simple définie sur un espace de dimension $s = 3$ [SCS00] :

$$f_1(X) = \sum_{j=1}^3 X^j$$

où $X = (X^1, X^2, X^3) \in [\frac{1}{2}; \frac{3}{2}] \times [\frac{3}{2}; \frac{9}{2}] \times [\frac{9}{2}; \frac{27}{2}]$.

Le indices de Sobol fractionnaires sont obtenus à l'aide d'un plan factoriel fractionnaire 2^{3-1} de résolution *III*. Les résultats sont donnés dans la colonne IS_u^{frac} du tableau 3.I. Les colonnes IS_u^{Sobol} et IS_u^{FAST} du tableau 3.I correspondent aux estimations obtenues à l'aide de la méthode Sobol et de la méthode FAST respectivement, où n est le nombre d'évaluations de la fonction. Pour ces dernières estimations nous avons utilisé la librairie "sensitivity" du logiciel R. Comme on peut le constater, pour une fonction linéaire le calcul des indices de Sobol fractionnaires donne la valeur exacte des indices de Sobol. Ce résultat n'est pas

	IS_u	$IS_u^{frac},$ $n = 4$	$IS_u^{Sobol},$ $n = 25$	$IS_u^{FAST},$ $n = 198$
$u = \{1\}$	$1/91 \approx 1,1 \times 10^{-2}$	1/91	7,45	$6,8 \times 10^{-3}$
$u = \{2\}$	$9/91 \approx 9,9 \times 10^{-2}$	9/91	7,04	$8,2 \times 10^{-2}$
$u = \{3\}$	$81/91 \approx 8,9 \times 10^{-1}$	81/91	1,26	$8,3 \times 10^{-1}$

Tableau 3.I – Estimations des indices de Sobol à l’aide d’un plan factoriel fractionnaire, de la méthode de Sobol et de la méthode FAST pour une fonction linéaire

surprenant dans la mesure où le modèle utilisé est un modèle linéaire. En revanche, bien que le nombre d’évaluations de la fonction soit supérieur, les estimations données par les méthodes de Sobol et FAST, sont nettement plus éloignées de la valeur exacte. Dans cet exemple de fonction, la dimension effective au sens de la superposition est de $d_s = 1$ et la dimension effective au sens de la troncature est de $d_t = 2$. Si l’on souhaite expliquer au moins 95% de la variance totale, la dimension effective donnée par l’équation (3.4) est $d = 2$.

3.2.2 Cas d’un test non-linéaire monotone

Nous utilisons comme deuxième fonction test une fonction non-linéaire monotone définie sur $[0, 1]^{20}$ [SCS00] :

$$f_2(X) = \exp \left(\sum_{i=1}^{s=20} b_i X^i \right) - \prod_{i=1}^{s=20} \frac{e^{b_i} - 1}{b_i}$$

où pour $1 \leq i \leq 3$, $b_i = 3$, pour $4 \leq i \leq 9$, $b_i = 0.6$ et pour $10 \leq i \leq 20$, $b_i = 0.00004$. Cette fonction dépend donc essentiellement de X^1 , X^2 et X^3 . Les variables X^4, \dots, X^9 sont moyennement importantes. Quant aux autres variables elles sont négligeables. Notons que si les variables (X^1, \dots, X^s) sont i.i.d. de loi uniforme sur $[0, 1]$, alors l’espérance $E \left(\exp \left(\sum_{i=1}^{20} b_i X^i \right) \right)$ est égale au deuxième terme de f_2 , à savoir $\prod_{i=1}^{20} \frac{e^{b_i} - 1}{b_i}$. Ainsi, nous avons $E(f_2(X)) = 0$.

Afin d’évaluer l’impact du plan sur le calcul des indices, nous utilisons différents plans.

Le premier plan est un FF 2^{20-11} de résolution V , où les 9 facteurs de base sont les variables les plus influentes. Les résultats sont donnés dans la colonne “ IS_u^{frac} P1” du tableau 3.II.

u	IS_u	IS_u^{frac} P1	IS_u^{frac} P2	u	IS_u	IS_u^{frac} P1	IS_u^{frac} P2
{1}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,2 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{10}	3×10^{-11}	$5,3 \times 10^{-3}$	$5,8 \times 10^{-4}$
{2}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,2 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{11}	3×10^{-11}	$5,5 \times 10^{-4}$	2×10^{-5}
{3}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,2 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{12}	3×10^{-11}	$5,5 \times 10^{-4}$	$9,6 \times 10^{-11}$
				{13}	3×10^{-11}	$5,7 \times 10^{-5}$	2×10^{-3}
{4}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	1×10^{-2}	{14}	3×10^{-11}	$5,5 \times 10^{-4}$	5×10^{-5}
{5}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	1×10^{-2}	{15}	3×10^{-11}	$4,7 \times 10^{-5}$	9×10^{-11}
{6}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	1×10^{-2}	{16}	3×10^{-11}	4×10^{-6}	7×10^{-11}
{7}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{17}	3×10^{-11}	4×10^{-6}	8×10^{-11}
{8}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	1×10^{-2}	{18}	3×10^{-11}	3×10^{-6}	9×10^{-11}
{9}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{19}	3×10^{-11}	$4,5 \times 10^{-4}$	8×10^{-11}
				{20}	3×10^{-11}	$5,7 \times 10^{-5}$	9×10^{-11}

Tableau 3.II – Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire. Le plan utilisé pour le calcul des indices est un plan à 512 expériences.

u	IS_u	IS_u^{frac} P1	IS_u^{frac} P2	u	IS_u	IS_u^{frac} P1	IS_u^{frac} P2
{1}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,3 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{10}	3×10^{-11}	6×10^{-11}	5×10^{-11}
{2}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,3 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{11}	3×10^{-11}	10^{-10}	5×10^{-11}
{3}	$1,5 \times 10^{-1}$	$9,3 \times 10^{-2}$	9×10^{-2}	{12}	3×10^{-11}	9×10^{-11}	7×10^{-11}
				{13}	3×10^{-11}	10^{-10}	6×10^{-11}
{4}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{14}	3×10^{-11}	8×10^{-11}	8×10^{-11}
{5}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{15}	3×10^{-11}	8×10^{-11}	7×10^{-11}
{6}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{16}	3×10^{-11}	8×10^{-11}	6×10^{-11}
{7}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{17}	3×10^{-11}	8×10^{-11}	6×10^{-11}
{8}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{18}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	7×10^{-11}
{9}	7×10^{-3}	$9,6 \times 10^{-3}$	9×10^{-3}	{19}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	7×10^{-11}
				{20}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	7×10^{-11}

Tableau 3.III – Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire. Le plan utilisé pour le calcul des indices est un plan à 1024 expériences.

Avec 512 expériences, les indices de Sobol fractionnaires nous permettent d'identifier les facteurs significatifs. En particulier, les 9 premier facteurs expliquent au moins 80% de la variance totale d'après l'équation 3.4. Cependant, l'ordre de grandeur des indices n'est retrouvé que pour les facteurs de base. En ce qui concerne les facteurs définis, qui expliquent chacun la même proportion de variance, on obtient des différences sur les indices de Sobol fractionnaires qui peuvent aller jusqu'à un facteur 10 000. Par conséquent le classement des

u	IS_u	IS_u^{frac} P2 $n=1024$	IS_u^{Sobol} $n=1100$	IS_u^{FAST} $n=1320$
{1}	$1,5 \times 10^{-1}$	9×10^{-2}	$4,7 \times 10^{-2}$	$9,7 \times 10^{-2}$
{2}	$1,5 \times 10^{-1}$	9×10^{-2}	$5,1 \times 10^{-2}$	$9,7 \times 10^{-2}$
{3}	$1,5 \times 10^{-1}$	9×10^{-2}	$4,7 \times 10^{-2}$	$9,7 \times 10^{-2}$
{4}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	$1,4 \times 10^{-2}$	$1,9 \times 10^{-2}$
{5}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	$1,4 \times 10^{-2}$	$1,9 \times 10^{-2}$
{6}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	7×10^{-3}	$1,9 \times 10^{-2}$
{7}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	$-2,4 \times 10^{-2}$	$1,9 \times 10^{-2}$
{8}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	$-9,1 \times 10^{-4}$	$1,9 \times 10^{-2}$
{9}	7×10^{-3}	9×10^{-3}	$1,2 \times 10^{-2}$	$1,9 \times 10^{-2}$
{10}	3×10^{-11}	5×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{11}	3×10^{-11}	5×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{12}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{13}	3×10^{-11}	6×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{14}	3×10^{-11}	8×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{15}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{16}	3×10^{-11}	6×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{17}	3×10^{-11}	6×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{18}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{19}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$
{20}	3×10^{-11}	7×10^{-11}	$-1,1 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-2}$

Tableau 3.IV – Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire. Le plan utilisé pour le calcul des indices est un plan à 1024 expériences.

facteurs définis est erroné.

Le deuxième plan est un FF 2^{20-11} , où cette fois-ci les 9 facteurs de base sont des variables non influentes. Les résultats sont donnés dans la colonne “ IS_u^{frac} P2” tableau 3.II.

Comme avec le plan précédent, nous pouvons identifier les facteurs significatifs. Les 9 premier facteurs expliquent au moins 71% de la variance totale d’après l’équation (3.4). Cependant, on peut remarquer que lorsque les facteurs les moins importants sont des facteurs de base, les résultats semblent être de meilleure qualité. Nous pensons que cela provient du fait que les facteurs de base ne sont aliasés à aucun autre facteur ni interaction. De ce fait, lorsque les variables peu influentes sont des facteurs définis, leurs effets se trouvent confondus avec ceux d’autres interactions et par conséquent surestimés. Ceci ne se produit pas lorsque

les variables peu influentes sont des facteurs de base. Contrairement au plan précédent, pour la plupart des facteurs non significatifs on retrouve le bon ordre de grandeur des indices.

Le troisième plan est un FF 2^{20-10} , où les 10 facteurs de base sont des variables influentes. Les résultats sont donnés dans la colonne “ IS_u^{frac} P1” tableau 3.III. Avec 1024 expériences, les indices de Sobol fractionnaires donnent le bon classement des variables. De plus, l’ordre de grandeur de l’indice est le même que celui des indices exacts. Nous pouvons ainsi constater que diminuer le nombre de facteurs définis permet d’augmenter la résolution du plan et ainsi de limiter les confusions d’effets, ce qui explique les meilleurs résultats obtenus avec 1024 expériences par rapport aux plans à 512 expériences. L’équation (3.4) nous donne, pour au moins 70% de variance expliquée, 9 facteurs significatifs. Le quatrième plan est un FF 2^{20-10} , où les 10 facteurs de base sont cette fois-ci des variables non influentes. Les résultats sont donnés dans la colonne “ IS_u^{frac} P2” tableau 3.III. Comme avec le plan précédent, les indices de Sobol fractionnaires donnent le bon classement des variables et, d’après l’équation (3.4), les 9 premiers facteurs expliquent au moins 70% de la variance totale. De plus, l’ordre de grandeur de l’indice est le même que celui des indices exacts. Si on compare les résultats obtenus à l’aide du troisième et du quatrième plan, on se rend compte que prendre des facteurs de base influents ou non ne modifie pas significativement la valeur des indices.

Bien que la fonction ne soit pas linéaire, les indices de Sobol fractionnaires permettent d’identifier les facteurs significatifs parmi des 20 variables même avec 512 expériences.

3.2.3 Cas d’un test non-linéaire non-monotone

Le troisième test de calcul des indices de Sobol fractionnaires que nous avons effectué concerne une fonction non linéaire non monotone définie sur $[-\frac{4\pi}{9}; \frac{5\pi}{2}] \times [0; \frac{26\pi}{9}]$:

$$f_3(X) = \sin(X^1) + \cos(X^2) - \cos(X^1) * \sin(X^2).$$

Cette fonction dépend autant de X^1 que de X^2 . Pour calculer les indices de Sobol fractionnaires, nous avons utilisé un plan factoriel complet 2^2 . La valeur exacte des indices de Sobol ainsi que leurs estimations à l’aide d’un plan factoriel fractionnaire, de la méthode de Sobol et de la méthode FAST sont données dans le tableau 3.V.

u	IS_u	IS_u^{frac} $n = 4$	IS_u^{Sobol} $n = 8$	IS_u^{FAST} $n = 132$
{1}	0,415	0,511	5,910	0,442
{2}	0,408	0.489	7,444	0,427

Tableau 3.V – Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire non monotone. Le plan utilisé pour le calcul des indices est un plan factoriel complet à 4 expériences.

Tout d'abord nous pouvons constater que la méthode de Sobol, avec un nombre d'expériences restreint, ne permet pas d'estimer correctement les indices de Sobol des variables. En revanche, les indices de Sobol fractionnaires, sont relativement proches de la valeur exacte avec seulement 4 expériences. Il est difficile de comparer les résultats avec la méthode FAST, dans la mesure où le nombre minimal d'expériences nécessaire est de 132. En deçà de ce nombre d'expériences, aucune estimation n'est possible. Il n'est donc pas surprenant qu'avec 132 expériences, les estimations obtenues soient plus proches de la valeur exacte qu'avec les indices de Sobol fractionnaires.

3.2.4 Contre-exemple

Nous prenons comme dernière illustration, le cas d'une fonction pour laquelle les indices de Sobol fractionnaires échouent dans l'estimation des indices de Sobol. Soit f_4 une fonction définie sur $[0, 1]^s$ par :

$$\begin{aligned}
f_4(X) = & \sum_{i=1}^4 \lambda_i (2X^i - 1) + 31(2X^5 - 1)^2 + \sum_{i=6}^{20} \lambda_i (2X^i - 1) + 31(2X^1 - 1)(2X^3 - 1) \\
& + 34(2X^2 - 1)(2X^4 - 1) + 1 \times 10^{-5}(2X^{18} - 1)(2X^{19} - 1) \\
& + 1,5 \times 10^{-5}(2X^{14} - 1)(2X^{15} - 1)
\end{aligned} \tag{3.5}$$

où les coefficients λ_i sont donnés dans le tableau 3.VI

Cette fonction est un polynôme avec des interactions. f_4 a 5 facteurs très importants (X^1, X^2, X^3, X^4, X^5), 3 moyennement importants (X^6, X^7, X^8) et 12 facteurs négligeables.

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}
30	4×10^{-5}	32	3×10^{-5}	1	1	1	5×10^{-5}	10^{-5}	6×10^{-5}	$1,5 \times 10^{-5}$

λ_{13}	λ_{14}	λ_{15}	λ_{16}	λ_{17}	λ_{18}	λ_{19}	λ_{20}
$2,5 \times 10^{-5}$	$3,5 \times 10^{-5}$	$4,5 \times 10^{-5}$	$5,5 \times 10^{-5}$	$6,5 \times 10^{-5}$	7×10^{-5}	$7,5 \times 10^{-5}$	8×10^{-5}

Tableau 3.VI – Liste des coefficients pour la fonction f_4 .

	IS_u^{frac}	IS_u
$u = \{1\}$	$2,22 \times 10^{-1}$	$3,42 \times 10^{-1}$
$u = \{2\}$	$3,96 \times 10^{-13}$	$6,08 \times 10^{-13}$
$u = \{3\}$	$2,53 \times 10^{-1}$	$3,89 \times 10^{-1}$
$u = \{4\}$	$2,22 \times 10^{-13}$	$3,42 \times 10^{-13}$
$u = \{5\}$	$5,98 \times 10^{-30}$	$2,19 \times 10^{-1}$
$u = \{6\}$	$2,47 \times 10^{-4}$	$3,8 \times 10^{-4}$
$u = \{7\}$	$2,47 \times 10^{-4}$	$3,8 \times 10^{-4}$
$u = \{8\}$	$2,47 \times 10^{-4}$	$3,8 \times 10^{-4}$
$u = \{9\}$	$6,18 \times 10^{-13}$	$9,5 \times 10^{-13}$
$u = \{10\}$	$2,47 \times 10^{-14}$	$3,8 \times 10^{-14}$

Tableau 3.VII – Les 10 premiers indices de Sobol du premier ordre pour la fonction f_4 .

La particularité de cette fonction test est que sa valeur en $X^5 = 0$ est la même que celle en $X^5 = 1$. Comme nous allons le constater, ce choix de niveau haut et bas pour X^5 renvoie une mauvaise estimation de l'indice de Sobol correspondant. Pour le calcul des indices de Sobol fractionnaires, nous avons utilisé un plan factoriel fractionnaire 2^{20-10} de résolution VI. Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 3.VII.

Comme on peut le constater, la valeur de $IS_{\{5\}}^{frac}$ est très faible, alors que la valeur exacte de l'indice de Sobol est de 22%.

Ainsi, dans ce cas particulier, à savoir une fonction, définie sur $[0, 1]^s$, contenant un terme de la forme $(x - \frac{1}{2})^2$, l'approximation des indices de Sobol par les indices de Sobol fractionnaires est très mauvaise. En pratique, puisque la forme analytique exacte de la fonction est inconnue, un tel comportement est difficile à prévoir. Cependant, il est toujours possible de tester la robustesse de l'estimation donnée par les indices de Sobol fractionnaires à l'aide d'une validation croisée. Plus précisément, il est possible de faire varier les valeurs réelles des facteurs correspondant aux niveaux hauts et bas puis de comparer les indices obtenus.

Dans le pire des cas, si les indices fractionnaires ne sont pas robustes, il est possible d'utiliser une méthode classique d'estimation des indices de Sobol telle que la méthode de Sobol ou la méthode FAST vues au chapitre 1. Rappelons que ces méthodes ne peuvent pas être utilisées pour des variables corrélées ou lorsque la dimension est grande et que le nombre d'évaluations de la fonction est restreint.

Ce cas illustre l'importance de bien choisir les niveaux hauts et bas des facteurs avant d'effectuer l'analyse de sensibilité.

3.3 Conclusion

Nous avons défini les indices de Sobol fractionnaires à partir d'un plan factoriel fractionnaire à deux niveaux dans le but d'estimer les indices de Sobol à moindre cout. Contrairement à l'approche par plan d'expériences décrite au chapitre 1, le calcul des indices de Sobol fractionnaires ne nécessite pas de supposer les résidus gaussiens. De plus, contrairement à l'analyse de variance fonctionnelle, également étudiée au chapitre 1, les indices de Sobol fractionnaires permettent la prise en compte de variables corrélées tout en effectuant un nombre raisonnable de simulations. Par la suite nous avons adapté la notion de dimension effective dans le cadre des indices de Sobol fractionnaires. La dimension effective ainsi définie nous permet d'évaluer le nombre de variables significatives en fonction de la proportion de variance de la fonction d'intérêt que l'on souhaite expliquer.

Les résultats numériques nous montrent que, dans la plupart des cas que nous avons testé, les indices de Sobol fractionnaires estiment relativement bien les indices de Sobol. Si les niveaux hauts et bas sont bien choisis, le classement des variables est correct et l'ordre de grandeur de l'indice est retrouvé.

CHAPITRE 4

CRITÈRE DE SÉLECTION D'UNE SUITE DÉDIÉE À LA FONCTION D'INTÉRÊT

Dans le cadre de l'intégration numérique par la méthode QMC, l'erreur d'estimation est étroitement liée à la discrédance. Nous avons détaillé au chapitre 2 les différentes discrédances existantes, qui permettent de quantifier l'écart à l'uniformité théorique d'une suite finie de points et qui sont liées à l'erreur d'intégration par la borne de Koksma-Hlawka. Toutefois, nous avons pu constater qu'aucune d'entre elles ne permettait de juger l'adéquation d'une suite finie de points à la fonction d'intérêt. La majoration de l'erreur d'intégration est alors celle pour le pire cas d'intégrande, ce qui peut être très pessimiste et éloigné de la valeur exacte de l'erreur d'estimation pour une fonction particulière. C'est pourquoi nous adaptons, dans ce chapitre, une discrédance existante, la discrédance L_2 -étoile pondérée, de sorte qu'elle permette de juger la qualité de répartition des projections d'une suite finie de points sur des sous-ensembles correspondant à des effets importants pour la fonction d'intérêt, dans l'espoir d'obtenir une majoration réaliste de l'erreur d'intégration. Pour cela, nous pondérons par les indices de Sobol fractionnaires définis au chapitre précédent.

Dans ce chapitre, nous commençons par définir la discrédance effective, qui reflète l'adéquation d'une suite de points à la fonction d'intérêt. Puis nous illustrons les qualités de ce critère à l'aide de tests numériques.

4.1 Introduction

Parmi les discrédances existantes, seule la discrédance L_2 -étoile pondérée permet de rendre compte de la répartition des points sur des sous-ensembles de $[0, 1]^s$ de dimension inférieure à la dimension initiale s . Cependant, comme nous l'avons expliqué au chapitre 2, le nombre de termes à évaluer dans la discrédance L_2 -étoile pondérée peut croître exponentiellement avec la dimension s . Par conséquent, en grande dimension, si le nombre de

points de la suite est élevé, le calcul de la discrédance L_2 -étoile pondérée peut s'avérer très long. Bien que des poids spécifiques permettent de simplifier le calcul (équation (2.10)), les poids en question ne correspondent pas toujours aux spécificités de la fonction d'intérêt. Les indices de Sobol constituerait une pondération idéale dans la prise en compte des sous-ensembles d'indices. Cependant leur estimation par les méthodes usuelles s'avère très coûteuse en nombre d'évaluations de la fonction. C'est pourquoi, nous utilisons une discrédance L_2 -étoile pondérée où les poids sont les indices de Sobol fractionnaires définis au chapitre précédent.

4.2 Définition

Nous avons montré au chapitre précédent que nous pouvions, à partir d'un plan d'expériences factoriel fractionnaire, obtenir une décomposition de la fonction d'intérêt en une somme de fonction α_{u_i} , $i = 1, \dots, k$, similaire à la décomposition de l'ANOVA fonctionnelle classique. A partir de cette décomposition, nous avons défini les indices de Sobol fractionnaires. Nous rappelons que l'indice de Sobol fractionnaire du sous-ensemble de variables indicées dans u_i , calculé à partir du plan d'expériences factoriel fractionnaire PEX , pour la fonction h est alors donné par (3.2) :

$$IS_{u_i}^{frac}(h, PEX) = \frac{\text{Var}(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}))}{\text{Var}(h)}.$$

Nous souhaitons utiliser les indices de Sobol fractionnaires de la fonction d'intérêt h pour pondérer les projections sur des sous-espaces de dimension faible dans le but de donner plus d'importance aux projections significatives. Nous appelons la discrédance L_2 -étoile pondérée ainsi obtenue la discrédance effective en référence à la dimension effective :

Définition 4.1.

Soit PEX le plan d'expériences à partir duquel nous évaluons les indices de Sobol fractionnaires. La discrédance effective D_{eff} d'une suite finie de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ pour la fonction h est définie par :

$$D_{eff}^2(x, h, PEX) = \sum_{i=1}^k IS_{u_i}^{frac}(h, PEX) D_{L_2,*}(x^{u_i})$$

où x^{u_i} est la projection de x sur le sous-espace des variables indicées dans u_i , $IS_{u_i}^{frac}(h, PEX)$ est l'indice de Sobol fractionnaire du sous-ensemble de variables indicées dans u_i défini par (3.2) et $D_{L_2,*}$ est la discrédance en norme L_2 -étoile donnée par (2.8).

D'après la remarque 3.1, chaque fonction α_{u_i} est définie pour la classe d'équivalence des interactions aliasées à X^{u_i} . Par conséquent, il en est de même pour chaque indice de Sobol fractionnaire. En revanche, ce n'est pas le cas de la projection de la suite finie x sur le sous-espace des variables indicées dans u_i . Par conséquent, le choix des sous-ensembles u_i , $i = 1, \dots, k$, est crucial pour la discrédance effective. Un mauvais choix de u_i peut mener à un critère inapte à décrire le comportement de la suite finie sur les projections significatives. C'est pourquoi il est essentiel de choisir les sous-ensembles les plus plausibles par rapport à la fonction h . Dans le cas où un tel choix s'avère impossible, nous avons souligné au chapitre précédent (remarque 3.2) qu'il était souvent préférable de prendre les sous-ensembles u_i de cardinal minimal, ce qui revient à supposer que la fonction h est de dimension effective faible au sens de la superposition. En pratique, il est relativement rare d'avoir des effets d'interactions d'ordre élevé très significatifs.

La discrédance est habituellement une propriété de la suite de points. Ici, la discrédance effective est une propriété conjointe de la suite de points et de l'intégrande. Cette caractéristique constitue le principal atout de la discrédance effective. Par rapport à une discrédance L_2 -étoile pondérée classique, le nombre de termes à sommer, pour le calcul de la discrédance effective, est au plus de $k = 2^{p_1} - 1$ ce qui est beaucoup moins que $2^s - 1$. De plus, en tant que discrédance L_2 -étoile pondérée, la discrédance effective est liée à l'erreur d'intégration

par la borne de Koksma-Hlawka pondérée (2.12) :

$$\left| I - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \right| \leq \|h\|_{s,\gamma} D_{L_2,*,\gamma}(x)$$

où la norme de h est donnée par (2.13) :

$$\|h\|_{s,\gamma} = \left(\sum_{u \subseteq \{1,\dots,s\}} \gamma_u^{-1} \int_{[0,1]^{|u|}} \left| \frac{\partial^{|u|} h(X^u, 1)}{\partial X^u} \right|^2 dX^u \right)^{1/2},$$

la discrédance L_2 -étoile pondérée de la suite de points $x = (x_1, \dots, x_n)$ est donnée par (2.9) :

$$D_{L_2,*,\gamma}(x) = \left[\sum_{\emptyset \neq u \subseteq \{1,\dots,s\}} \gamma_u D_{L_2,*}(x^u) \right]^{\frac{1}{2}}$$

et

$$\gamma_u = \begin{cases} IS_{u_i}^{frac}(h, PEX) & \text{si } \exists i \in \{1, \dots, k\} \text{ tel que } u = u_i \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.1)$$

Toutefois, la pondération par les indices de Sobol fractionnaires n'est intéressante qu'à la condition que la somme des indices de Sobol fractionnaires $IS_{u_i}^{frac}$ pour $i = 1, \dots, k$, soit proche de 1. Dans le cas contraire, la majoration donnée par la borne de Koksma-Hlawka pondérée pourrait être proche de zéro sans pour autant que la valeur de l'erreur d'intégration soit faible, notamment si tous les poids γ_u sont nuls et que la fonction h n'est pas constante. De plus, nous avons souligné à la section 2.3.2 que la variation était une quantité à la fois difficile à estimer et peu essentielle à la prédiction de l'erreur d'intégration. On se contente alors de la discrédance comme indicateur du comportement de l'erreur d'intégration. Si la somme des indices de Sobol fractionnaires est proche de 0, cela signifie que chacun des sous-ensemble de variables indicées dans u_i , pour $i = 1, \dots, k$, explique une faible proportion de la variance totale de h . Par conséquent, l'erreur d'intégration pourrait avoir un comportement différent de celui de la discrédance effective. Enfin, notons que la pondération (??) présuppose que les composantes d'ANOVA fonctionnelle sont constantes pour les sous-ensembles u tels

que $\gamma_u = 0$.

Afin de voir si la discr pance effective d crit correctement la qualit  de r partition sur les projections significatives et afin de comparer son comportement par rapport   celui de l'erreur d'int gration, nous pr sentons dans la section suivante les r sultats obtenus pour diff rentes fonctions test.

4.3 R sultats de tests num riques

4.3.1 Cas lin aire avec interactions

Le nombre de variables, dans le cadre du calcul de SIR, est d'environ 30. Le premier cas test que nous avons choisi est donc une fonction de dimension $s = 20$ proche de celle de notre code num rique. Nous partons de l'hypoth se que la fonction est de dimension effective faible au sens de la superposition. Nous faisons cette hypoth se en raison des r sultats des plans d'exp riences (que nous pr senterons au chapitre 6) sur notre code informatique qui semblent montrer que les interactions d'ordre sup rieur   3 sont n gligeables. La premi re fonction que nous pr sentons dans cette section est une fonction lin aire avec interactions. Plus pr cis ment, soit

$$h_1(X) = \sum_{j=1}^{s=20} \lambda_j X^j + 31X^1 X^3 + 34X^2 X^4 + 1,5 \cdot 10^{-5} X^{14} X^{15} + 10^{-5} X^{18} X^{19} \quad (4.2)$$

d finie sur $[-1, 1]^{20}$ o  les coefficients λ_j , $j = 1, \dots, s$, sont donn  dans le tableau suivant

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}
30	$4 \cdot 10^{-5}$	32	$3 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$	1	1	1	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$
λ_{11}	λ_{12}	λ_{13}	λ_{14}	λ_{15}	λ_{16}	λ_{17}	λ_{18}	λ_{19}	λ_{20}
$6 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$4,5 \cdot 10^{-5}$	$5,5 \cdot 10^{-5}$	$6,5 \cdot 10^{-5}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$7,5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$

Au regard de la forme analytique de h_1 , on constate que seules X^1 , X^2 , X^3 , et X^4 sont tr s significatives, soit en raison de leur effet principal, soit en raison d'un effet d'interaction. Les variables X^6 , X^7 et X^8 sont moyennement significatives. Les autres variables n'ont qu'une

très faible influence sur h_1 . Le calcul des indices de Sobol fractionnaires a été effectué à l'aide d'un plan factoriel fractionnaire 2^{20-10} de résolution VI . Le modèle qui a été utilisé est composé de $k = 210$ facteurs et interactions, à savoir, les 20 facteurs et les 190 interactions d'ordre deux. Le choix de ce modèle revient à négliger les interactions d'ordre supérieures ou égales à 3, ce qui est cohérent avec la forme analytique de la fonction h_1 . Nous avons, tout d'abord, calculé la discrédance effective de deux suites de Halton. Nous rappelons que les suites à discrédance faible sont définies sur $[0, 1]^s$ alors que h_1 (4.2) est définie sur $[-1; 1]^s$. Par conséquent, nous nous ramenons à cet espace par un simple changement de variable en posant, pour tout $j = 1, \dots, s$, $X^j = 2X'^j - 1$, avec $X'^j \in [0, 1]$. Les bases b_j , $j = 1, \dots, s$ de la première suite de Halton sont les s premiers entiers premiers $b_1 = 2, \dots, b_{20} = 71$. Les bases b_j , $j = 1, \dots, s$ de la deuxième suite de Halton sont les s premiers entiers premiers dont l'ordre a été inversé $b_1 = 71, \dots, b_{20} = 2$. Ces deux suites sont désignées sur les figures par H20(1) et H20(2) respectivement. Nous avons mis en évidence dans la section 2.3.4 que chacune des bases de la suite de Halton détermine la longueur du cycle de construction des points sur chaque projection uni-dimensionnelle correspondante. Pour que l'hypercube unité $[0, 1]^s$ soit uniformément échantillonné, il est nécessaire d'utiliser un nombre de points égal à un multiple des s bases. De même, pour chaque projection sur un hypercube unité $[0, 1]^d$ de dimension d inférieure à la dimension initiale s , il est nécessaire d'utiliser un nombre de points égal à un multiple des d bases correspondantes. Ainsi, pour la suite H20(1), les projections incluant uniquement les premières variables nécessitent moins de points pour être échantillonnées uniformément que celles de la suite H20(2). En particulier, les projections sur $[0, 1]^2$ significatives pour h_1 , à savoir les plans (X'^1, X'^3) et (X'^2, X'^4) sont mieux échantillonnées avec H20(1) qu'avec H20(2). Les figures 4.1 et 4.2 illustrent la qualité des projections de 1000 points de ces deux suites de Halton, sur les plans (X'^1, X'^3) et (X'^2, X'^4) respectivement. Comme on peut le constater, les plans engendrés par les couples de variables (X'^1, X'^3) et (X'^2, X'^4) sont moins bien échantillonnés avec la deuxième suite de Halton (H20(2)) qu'avec la première (H20(1)).

Afin de s'assurer que la discrédance effective permet de rendre compte de cette différence de qualité d'échantillonnage, nous avons tracé sur la figure 4.3 la discrédance effective, en échelle logarithmique, des deux suites de Halton en fonction du nombre de points n pour la

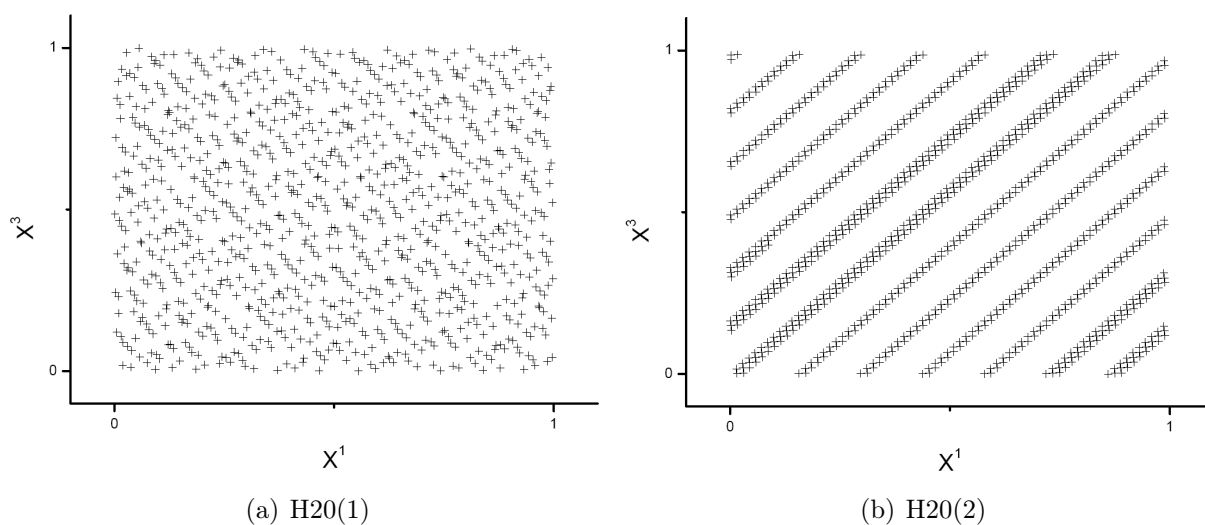


Figure 4.1 – Projections de 1000 points sur les coordonnées (X^1, X^3) de deux suites de Halton

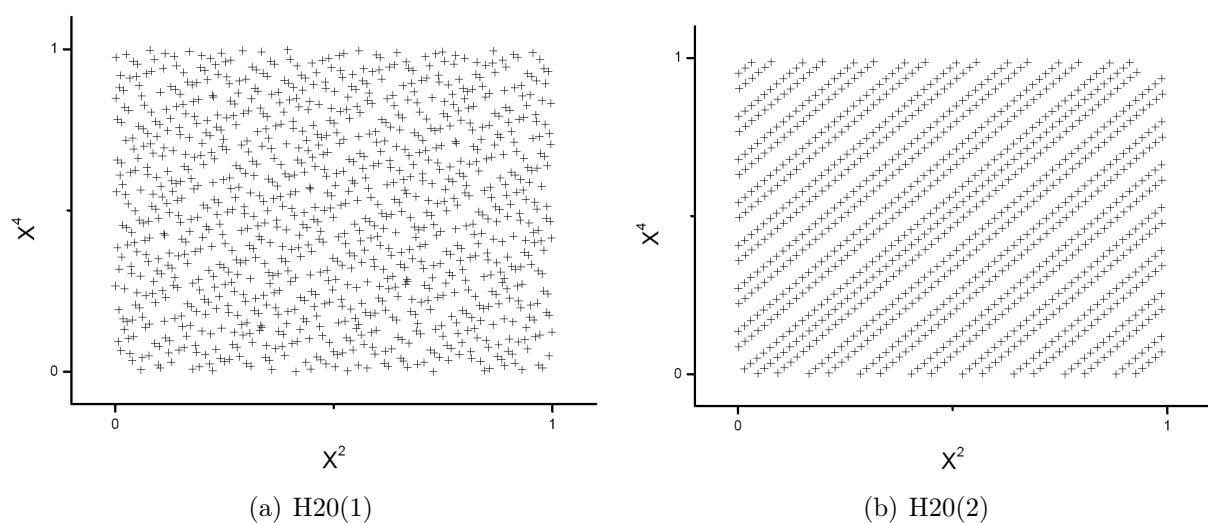


Figure 4.2 – Projections de 1000 points sur les coordonnées (X^2, X^4) de deux suites de Halton.

fonction h_1 . Nous pouvons ainsi constater que la discrétance effective de la suite de Halton (H20(2)), qui présente des irrégularités de répartition sur les projections significatives, est nettement supérieure à celle de l'autre suite de Halton (H20(1)). La discrétance effective de 10 000 points de la suite H20(1) est de 2.10^{-4} contre 10^{-3} pour celle de H20(2), ce qui

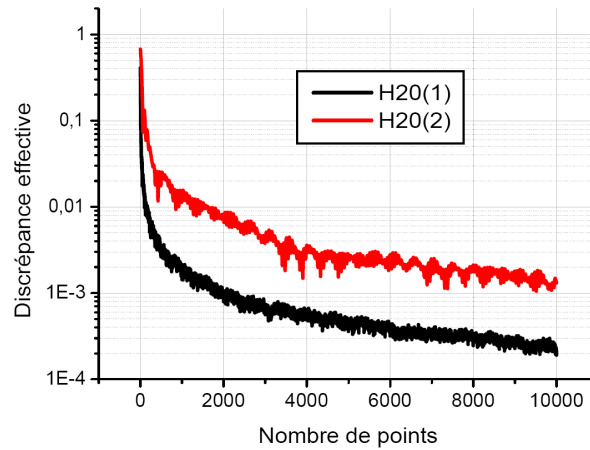


Figure 4.3 – Discrépance effective de 2 suites de Halton pour la fonction h_1 en fonction du nombre de points.

représente presque un facteur dix entre les deux discrédances effectives. La différence entre les deux suites de Halton réside uniquement dans l'ordre des bases choisies. Par conséquent, au vu de l'équation (2.8), elles ont toutes deux la même discrédance carrée moyenne et au vu du théorème 4.4, la même majoration de la discrédance infinie à l'origine, comme l'illustre la figure 4.4.

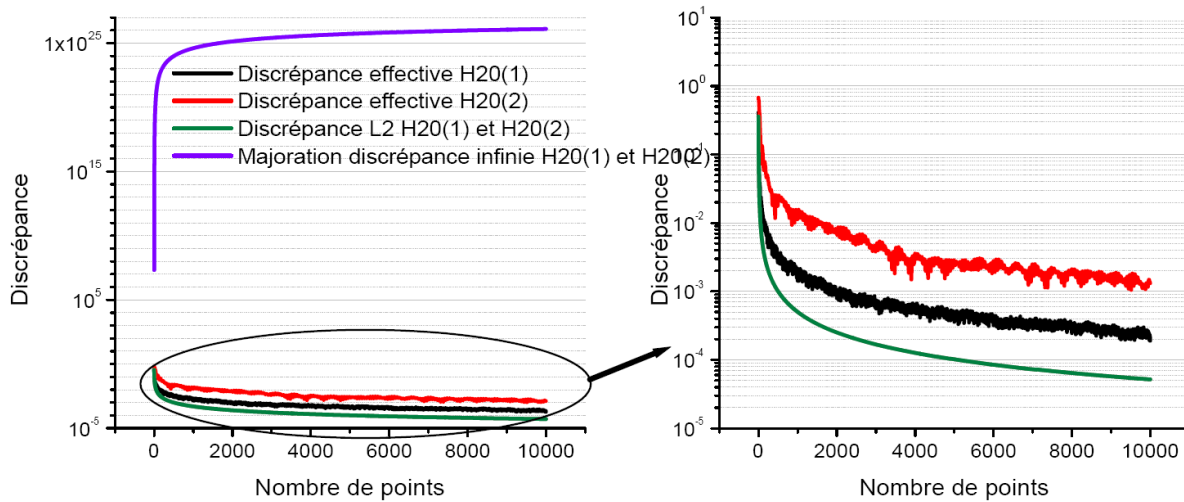


Figure 4.4 – Discrédance effective, discrédance carrée moyenne et majoration de la discrédance infinie pour 2 suites de Halton en fonction du nombre de points.

Nous avons supposé qu'un mauvais échantillonnage des projections significatives pour la fonction pouvait influencer de manière négative sur la précision des résultats de l'intégration numérique. Afin de vérifier cette hypothèse, nous avons calculé l'estimateur QMC (2.4) de l'intégrale $I = E(h_1) = 0$ pour les deux suites de Halton. La figure 4.5 représente l'erreur d'intégration $|I - I_n^{QMC}|$, sur une échelle logarithmique, en fonction du nombre de points n . Comme nous pouvons le constater, l'erreur d'intégration est plus élevée lorsque la suite utilisée présente des irrégularités de répartition sur les projections significatives. En particulier, avec $n = 9000$ points, l'erreur d'intégration pour la suite H20(2) est de l'ordre de 0,19, contre 0,03 pour la suite H20(1). Comme dans le cas des discrédances, on trouve presque un facteur dix entre les deux erreurs d'intégration. Des résultats identiques sont observés sur d'autres familles de suites, comme l'illustre la figure 4.6. Pour des raisons de lisibilité, le graphe 4.6(b) est celui de la moyenne glissante notée *moygliE* de l'erreur, sur 500 points, définie pour tout entier m , $500 \leq m \leq n$ par

$$moygliE(m) = \frac{\sum_{i=1}^{500} |I - I_{m-i+1}^{QMC}|}{500}.$$

Nous pouvons ainsi constater que, pour cette fonction, la discrédance effective de la suite de Sobol est la plus faible, avec une valeur de $1,5 \cdot 10^{-4}$ à 10 000 points, et celle de la suite pseudo-aléatoire est la plus élevée, avec une valeur de $3 \cdot 10^{-3}$ à 10 000 points. De même l'erreur d'intégration de la suite de Sobol est la plus faible ($6 \cdot 10^{-3}$ pour $n = 10000$ points), et celle de la suite pseudo-aléatoire est la plus élevée ($0,2 \cdot 10^{-1}$ pour $n = 10000$ points). Nous pouvons ainsi constater que le classement des suites en fonction de la discrédance effective est le même que celui en fonction de l'erreur d'intégration. De plus, la figure 4.6(b) met en évidence que la méthode QMC peut être nettement plus performante que la méthode MC même en dimension supérieure à 10.

Nous avons tracé sur la figure 4.7 l'erreur d'intégration ainsi que la discrédance effective, en fonction du nombre de points n , de la suite de Halton ayant pour base les 20 premiers entiers premiers dans l'ordre décroissant. Nous pouvons constater que ces deux courbes oscillent en fonction du nombre de points n . Ces faits expérimentaux sont encore mal expliqués

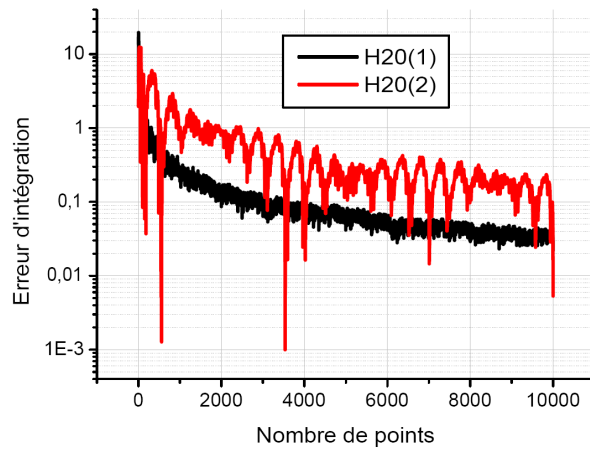


Figure 4.5 – Erreur d'intégration avec 2 suites de Halton pour h_1 en fonction du nombre de points.

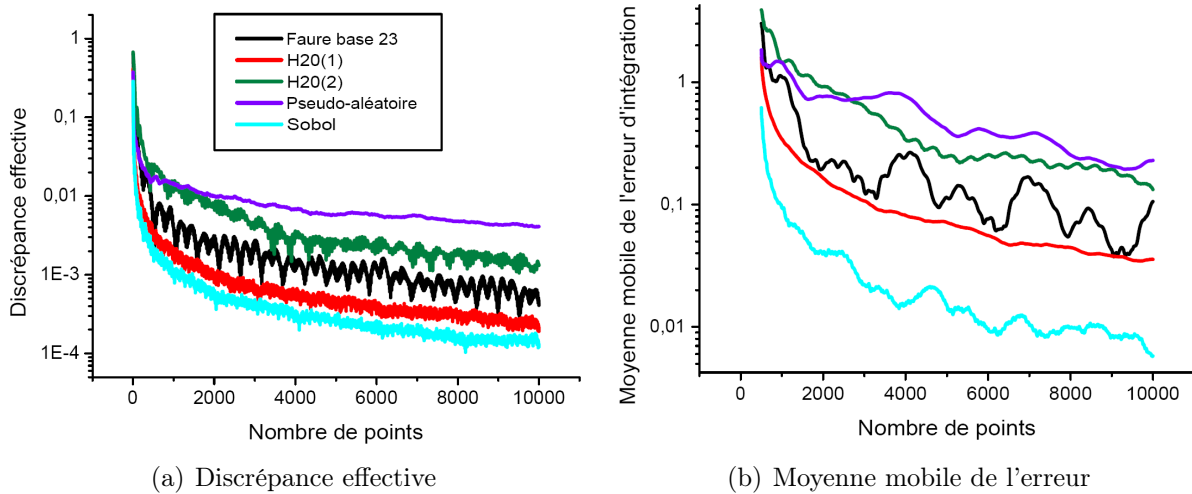


Figure 4.6 – Erreur d'intégration et discrédance effective d'une suite de Faure, 2 suites de Halton, une suite pseudo-aléatoire et une suite de Sobol pour h_1 en fonction du nombre de points.

mais leur compréhension pourrait permettre de prévoir le nombre de points pour lequel l'erreur d'intégration est minimale. Nous proposons ici une ébauche d'explication pour tenter de prévoir heuristiquement les minima de l'erreur d'intégration. Nous pouvons supposer que les oscillations régulières de la discrédance effective sont dues à la construction cyclique de la suite de Halton H20(2). La période de remplissage de l'espace pour une suite de Halton est

un multiple commun à toutes les bases 2.3.4. En l'occurrence, la période est le produit des bases b_i , $i = 1, \dots, 20$, à savoir les 20 premiers entiers premiers 71; ...; 2 dont le produit vaut $5,6 \cdot 10^{26}$. Cependant, dans la discrédance effective, la majorité des projections sont pondérées par un coefficient quasi nul ou nul. Dans cet exemple, les plus petits multiples communs des bases des projections pondérées par un coefficient élevé sont $71 * 61 = 4331$ pour (X'^1, X'^3) , et $67 * 59 = 3953$ pour (X'^2, X'^4) . Il est donc plausible d'obtenir un minimum proche de 3953 et un minimum proche de 4331. Les minimums effectivement observés ont lieu pour $n = 3904$ et $n = 4330$. La différence entre la valeur observée 3904 et la valeur attendue 3953 peut s'expliquer par le fait que 3904 est un multiple de 61 et proche d'un multiple de 71. Les minima observés avant $n = 3904$, comme en $n = 3477$, s'expliquent également par le fait que pour chacun d'eux, n est proche d'un multiple de plusieurs des bases 71, 67, 61, 59.

La périodicité des minima de la discrédance effective se retrouve également pour l'erreur d'intégration. Nous pouvons penser que, chaque fois que l'espace des projections significatives sera rempli de manière uniforme, l'erreur d'intégration sera minimale. Pour la suite, H20(1) et la suite de Faure en base 23, on retrouve également la correspondance des minima de l'erreur d'intégration avec ceux de la discrédance effective sans décalage de points. Malheureusement, pour la suite de Sobol, nous n'avons pas identifié ce phénomène.

Nous avons suggéré une explication à la correspondance des minima de la discrédance effective et de l'erreur d'intégration pour les suites de Halton. En superposant l'erreur d'intégration à la discrédance effective de la suite H20(2), nous pouvons remarquer que les minima de la discrédance effective, de même amplitude que ceux de l'erreur d'intégration, ont lieu environ 350 points après ceux de l'erreur. La translation des minima de la discrédance effective d'environ 350 points par rapport à ceux de l'erreur d'intégration, représentée par les verticales vertes sur la figure 4.7, correspond à un décalage d'environ une période de la discrédance effective. Cependant nous n'avons pas d'explication à ce décalage.

Nous souhaitons connaître également l'impact de la réduction de dimension sur la qualité de l'estimateur QMC. Pour cela, nous avons comparé la discrédance effective et l'erreur d'intégration de suites de Halton pour lesquelles nous avons fixé les variables les moins significatives à une constante. Sur la figure 4.8, les suites notées H7 sont des suites de Halton en dimension 7, la première, notée H7(1), est définie sur les bases constituées des

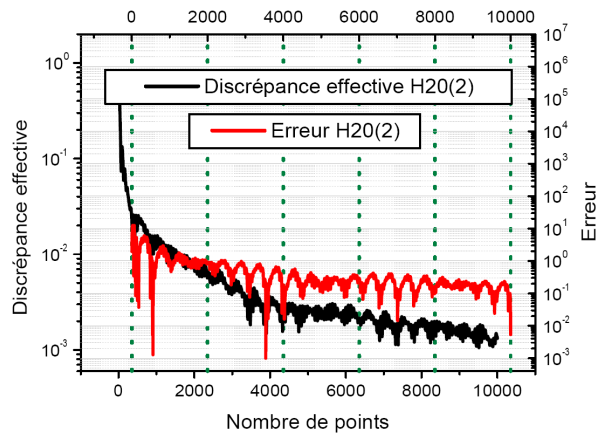
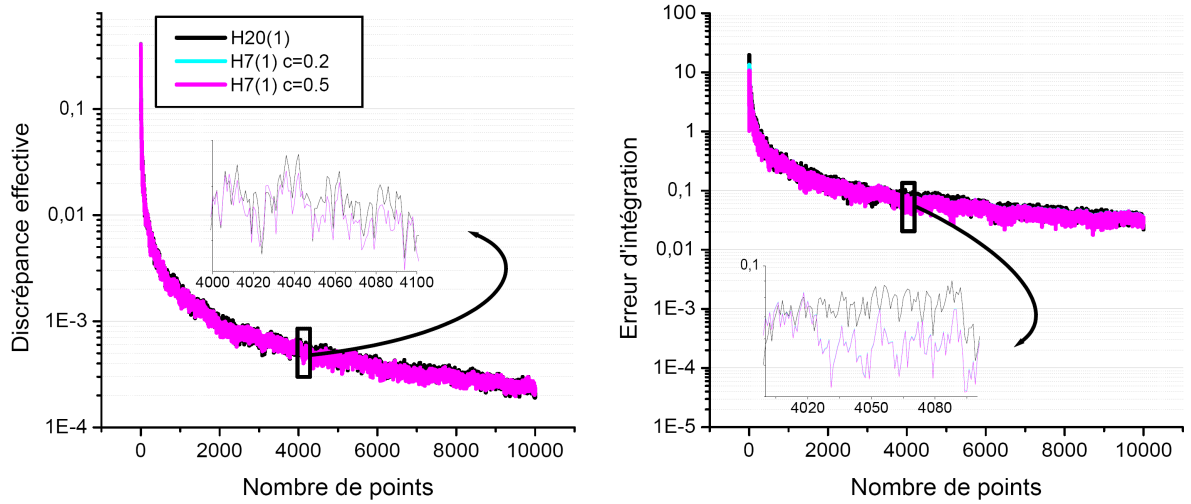


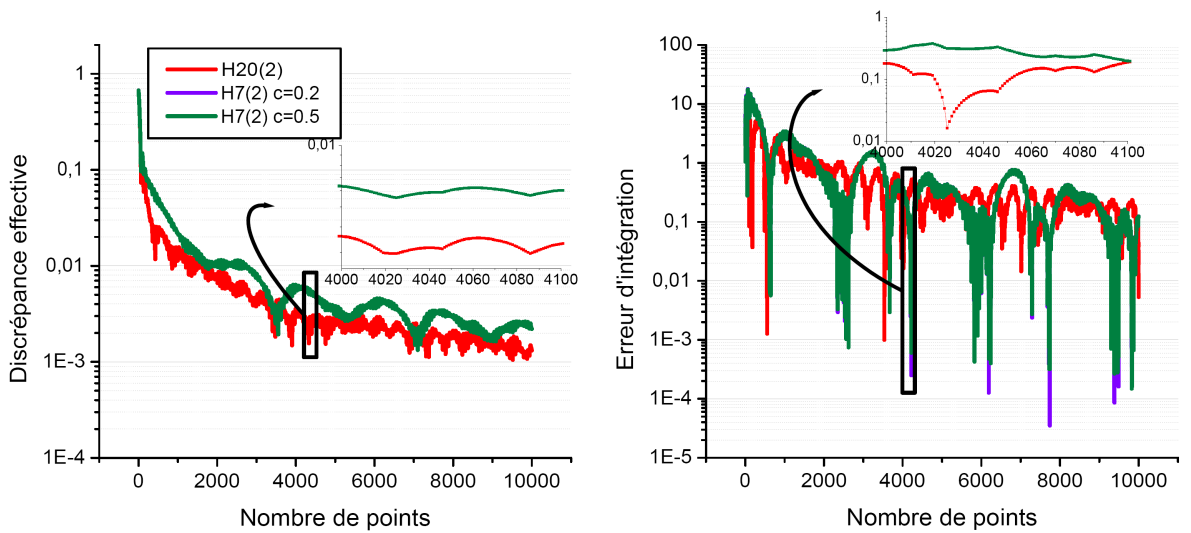
Figure 4.7 – Erreur d’intégration avec une suite de Halton et discrédance effective de cette même suite pour h_1 en fonction du nombre de points.

7 premiers entiers premiers 2; 3; 5; 7; 11; 13; 17, la deuxième, notée H7(2), est définie sur les bases constituées des entiers premiers 71; 67; 61; 59; 53; 47; 43. La valeur c est celle de la constante à laquelle les 13 variables les moins significatives sont fixées. Sur la figure 4.9, les suites notées H5 sont des suites de Halton en dimension 5, la première, notée H5(1), est définie sur les bases constituées des 5 premiers entiers premiers 2; 3; 5; 7; 11, la deuxième, notée H5(2), est définie sur les bases constituées des entiers premiers 71; 67; 61; 59; 53. La valeur c est celle de la constante à laquelle les 15 variables les moins significatives sont fixées.

Comparons tout d’abord les suites pour lesquelles 7 variables sont échantillonnées selon une suite de Halton, à savoir H7(1) et H7(2) (figure 4.8). Nous pouvons constater que, lorsque les projections significatives présentent des irrégularités de répartition (figure 4.8(b)), la discrédance effective et l’erreur d’intégration sont plus élevées que celles des suites bien échantillonnées sur les projections importantes (courbes en bleu et en noir figure 4.8(a)). Dans le cas des suites mal échantillonnées, fixer les variables non significatives à une valeur constante (courbes en violet et en vert figure 4.8(b)) provoque une décroissance moins rapide de la valeur de la discrédance effective ainsi que de celle de l’erreur d’intégration par rapport à la suite de Halton en dimension 20 (H20(2), courbes en rouge figure 4.8(b)). A l’inverse, lorsque les variables significatives sont mieux échantillonnées (figure 4.8(a)) la discrédance effective et l’erreur d’intégration sont plus faibles. De plus, nous pouvons remarquer que



(a) Erreur et discrétance effective de suites de Halton bien échantillonnées



(b) Erreur et discrétance effective de suites de Halton mal échantillonnées

Figure 4.8 – Erreur d’intégration et discrétance effective de suites pour lesquelles les 7 variables les plus significatives sont échantillonnées selon une suite de Halton, les autres étant fixées à une constante, pour h_1 en fonction du nombre de points.

dans ce cas, fixer les variables non significatives à une valeur constante ne modifie que très peu la discrétance effective et l’erreur d’intégration. Enfin, que les projections importantes soient bien échantillonnées ou non, une modification de la valeur de la constante ne modifie

ni la valeur de la discrédance effective, ni celle de l'erreur.

Comparons maintenant les suites pour lesquelles seules 5 variables sont échantillonnées selon une suite de Halton, à savoir H5(1) et H5(2) (figure 4.9). On constate en premier

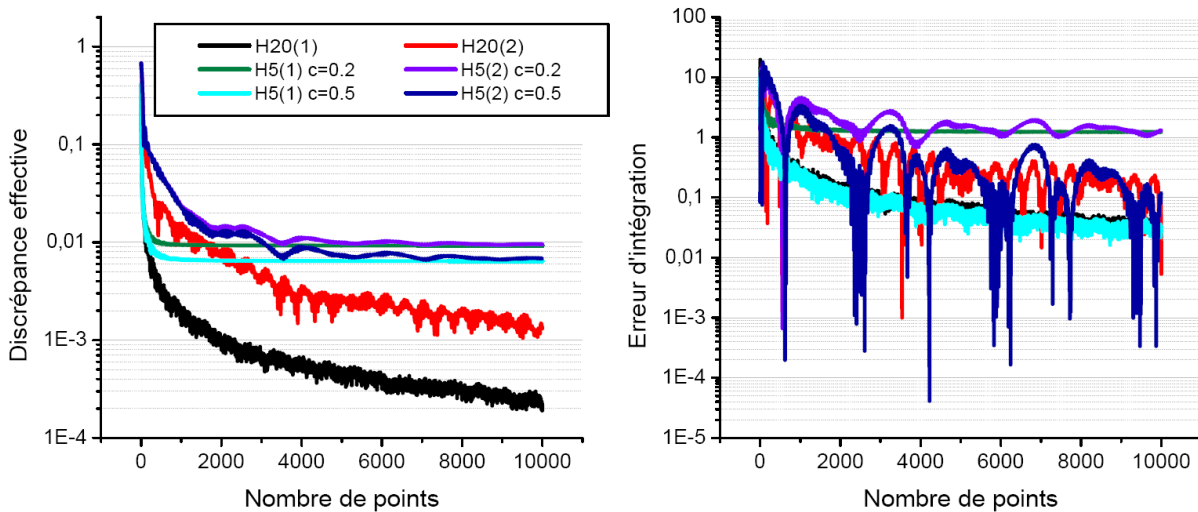


Figure 4.9 – Erreur d'intégration et discrédance effective de suites pour lesquelles les 5 variables les plus significatives sont échantillonnées selon une suite de Halton, les autres étant fixées à une constante, pour h_1 , en fonction du nombre de points.

lieu, que même lorsque les 5 variables les plus significatives sont bien échantillonnées, la discrédance effective des suites H5(1) et H5(2) est plus élevée que celle des 2 suites de Halton en dimension 20 H20(1) et H20(2). En fait ceci n'est pas très surprenant. En fixant X^7 et X^8 à une constante, la discrédance sur les projections respectives restera élevée. Or, la fonction h_1 comporte 4 variables très significatives et 3 variables moyennement significatives. La variance expliquée par X^7 et X^8 est donc relativement importante et les poids des discrédances des projections correspondantes également. Par conséquent la discrédance effective ne diminuera plus lorsque la somme pondérée des discrédances des projections importantes sera négligeable par rapport à celle des discrédances des projections sur X^7 et X^8 . Lorsque les 15 variables les moins significatives sont fixées à 0,2, on observe que l'erreur d'intégration est globalement la même lorsque les 5 variables les plus importantes sont uniformément échantillonnées (H5(1) $c=0,2$, en vert) ou pas (H5(2) $c=0,2$, en violet). Ce phénomène s'explique également par le fait que 5 variables n'expliquent pas suffisamment de variance. Comme pour la discrédance

effective, fixer les variables X^7 et X^8 à une constante introduit un biais sur l'estimateur correspondant. En revanche, lorsque les 15 variables les moins significatives sont fixées à 0,5, l'erreur est de nouveau plus élevée lorsque les 5 variables les plus significatives sont mal échantillonnées (H5(2) $c=0,5$, bleu foncé) que dans le cas inverse (H5(1) $c=0,5$, bleu clair). En fait, si on effectue le changement de variable pour se ramener à $[-1, 1]$, la valeur de la constante 0,5 correspond à $X^7 = 0$ et $X^8 = 0$. Or, la valeur de l'intégrale que l'on cherche à estimer est égale à 0. Il n'est donc pas surprenant d'avoir un meilleur estimateur pour $X^7 = 0$ et $X^8 = 0$.

Sur cet exemple, la discrédance effective semble être un bon critère pour juger de la qualité de répartition des projections significatives. En outre, elle est corrélée à l'erreur d'intégration. Elle peut donc être utilisée pour comparer différentes suites dont les discrédances usuelles, telles que la discrédance en norme L2, sont identiques. Enfin, la discrédance effective permet également de s'assurer que le pourcentage de variance expliqué par les variables significatives est suffisant.

4.3.2 Cas d'une indicatrice

Nous avons expliqué, dans l'introduction de ce mémoire, que nous souhaitions estimer une probabilité. Dans ce cas, la fonction d'intérêt est une indicatrice. Nous nous intéressons en particulier à une probabilité de dépassement de seuil. C'est pourquoi nous avons choisi pour deuxième fonction test l'indicatrice qu'un polynôme de degré 1 soit inférieur à un seuil fixé :

$$h_2(X) = \mathbb{1}_{\{f_5(X) < -40\}}(X) \quad (4.3)$$

définie sur $[0, 1]^6$, où

$$f_5(X) = -6,5 \cdot 10^{-5} - 2X^1 - 68X^2 + 2X^3 - 68X^4 + 4 \cdot 10^{-5}X^5 + 3 \cdot 10^{-4}X^6 + 136X^2X^4.$$

Contrairement au cas test précédent, la dimension s est petite afin de pouvoir calculer de manière analytique la valeur de l'intégrale $E(h_2(X))$. La valeur exacte de $E(h_2(X))$ est approximativement 0,26. La fonction indicatrice ne pouvant prendre que 2 valeurs, il y a

de nombreuses configurations pour lesquels basculer de la valeur haute à la valeur basse de la variable ne change pas la valeur de l'indicatrice. De ce fait, les plans factoriels à 2 niveaux sont de peu d'utilité pour estimer les indices de Sobol des fonctions indicatrices. Par conséquent, au lieu de calculer les indices de Sobol fractionnaires de l'indicatrice, nous calculons les indices de Sobol fractionnaires du polynôme f_5 . Il est vrai que les indices de Sobol de f_5 sont différents de ceux de h_2 , cependant, si une variable est très significative pour le polynôme, on peut penser que sa valeur sera déterminante pour faire basculer la valeur du polynôme de l'autre côté du seuil et donc pour faire basculer la valeur de l'indicatrice. Par conséquent, nous supposons que les variables et les interactions significatives pour le polynôme sont des variables et des interactions significatives pour l'indicatrice. Au regard de la forme analytique de f_5 , on constate que X^1 , X^2 , X^3 et X^4 sont significatives soit en raison de leur effet principal, soit en raison de leur effet d'interaction. X^5 et X^6 sont quant à elles négligeables. Le calcul des indices de Sobol fractionnaires a été effectué à l'aide d'un plan factoriel fractionnaire 2^{6-1} de résolution *VI*. Le modèle qui a été utilisé est composé de $k = 21$ facteurs et interactions, à savoir les 6 facteurs et les 15 interactions d'ordre deux. Comme pour la fonction test précédente, nous commençons par comparer la discrédance effective de différentes suites à discrédance infinie faible, dont les projections significatives sont plus ou moins bien échantillonnées, en fonction du nombre de points.

Les suites utilisées sont tout d'abord une suite de Halton en dimension 6 ayant pour bases les 6 premiers entiers premiers 2; 3; 5; 7; 11; 13, notée H6(1). La deuxième suite est une suite de Halton en dimension 6 ayant pour bases les entiers premiers 173; 167; 157; 163; 151; 149, notée H6(2). Comme précédemment, nous évaluons l'impact des variables non significatives en utilisant des suites de Halton prolongées. La première suite prolongée, notée H4(1) est une suite de Halton en dimension 4 ayant pour bases les 4 premiers entiers premiers 2; 3; 5; 7, les 2 variables les moins significatives sont fixées à une constante, en l'occurrence 0,2. La deuxième suite prolongée, notée H4(2) est une suite de Halton en dimension 4 ayant pour bases les entiers premiers 173; 167; 157; 163, les 2 variables les moins significatives sont également fixées à une constante égale à 0,2. La dernière suite utilisée est une suite pseudo-aléatoire. La figure 4.10 représente la discrédance effective, sur une échelle logarithmique, de ces suites en fonction du nombre de points pour la fonction h_2 . Dans la mesure où nous avons considéré

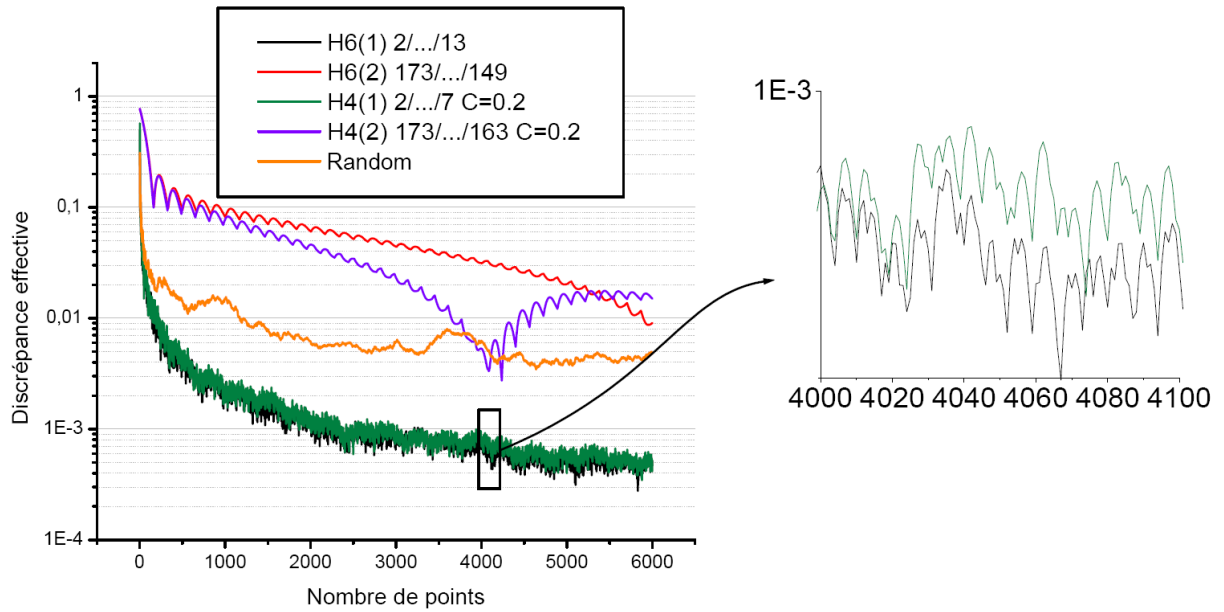


Figure 4.10 – Comparaison de la discrédance effective de 4 suites de Halton pour la fonction indicatrice h_2 .

que les indices de Sobol de h_2 étaient identiques à ceux de f_5 , la discrédance effective pour h_2 est identique à la discrédance effective pour f_5 . Il n'est donc pas surprenant ici de retrouver des résultats similaires au cas test précédent. A savoir, la discrédance effective est plus faible lorsque les variables significatives sont bien échantillonnées et inversement. Nous pouvons remarquer également, que la discrédance effective d'une suite pseudo-aléatoire est supérieure à celle des suites bien échantillonnées et inférieure à celle des suites mal échantillonnées.

La comparaison des erreurs d'intégration est présentée sur la figure 4.11. Le graphe représente l'erreur relative, c'est-à-dire l'erreur divisée par la valeur exacte de l'intégrale $\frac{|I - I_n^{QMC}|}{I}$ des 4 suites de Halton ainsi que de la suite pseudo-aléatoire. Comme dans le cas test précédent, lorsque les variables et interactions significatives sont bien échantillonnées (H6(1) et H4(1)), l'erreur est plus faible que dans le cas inverse (H6(2) et H4(2)). Ce comportement est similaire à celui de la discrédance effective. De plus, nous pouvons remarquer que l'erreur relative de la suite de Halton prolongée bien échantillonnée sur les 4 variables les plus significatives (H4(1)) est légèrement plus élevée que celle de la suite de Halton non prolongée (H6(1)). Ce comportement se retrouve également pour la discrédance effective bien que ce

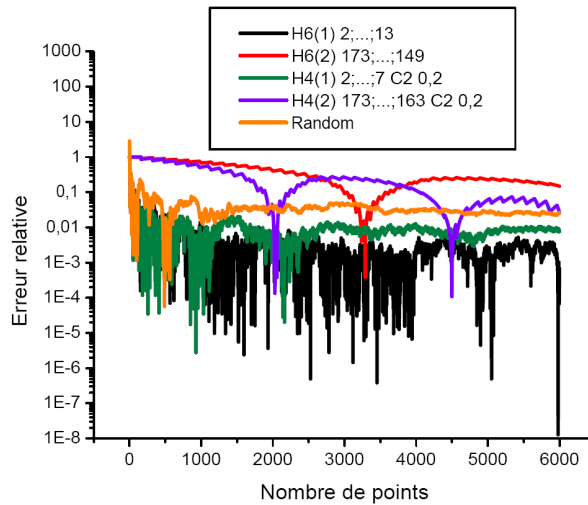


Figure 4.11 – Erreur relative de 4 suites de Halton pour la fonction indicatrice h_2 en fonction du nombre de points.

ne soit pas très visible sur la figure 4.10.

Bien que les indices de Sobol fractionnaires ne soient pas ceux de l'indicatrice mais ceux de la fonction définissant son support, la discrédance effective est encore corrélée à l'erreur d'intégration.

4.3.3 Contre-exemples

Nous souhaitons mettre en évidence dans cette section les cas où la discrédance effective échoue à décrire la répartition des projections sur les sous-ensembles significatifs. Nous avons pu constater dans la section 3.2.4, qu'un mauvais choix des niveaux haut et bas pour le calcul des indices de Sobol fractionnaires pouvait conduire à une mauvaise estimation des indices de Sobol. Le premier cas auquel nous nous intéressons correspond à cette situation. Nous reprenons la fonction f_4 définie sur $[0, 1]^s$ par l'équation (3.5). Le calcul des indices de Sobol fractionnaires est donné dans le tableau 3.VII. La figure 4.12 présente, à gauche, la discrédance effective de différentes suites de Halton ainsi que l'erreur relative, à droite, pour l'estimation de $E(f_4(X))$, en fonction du nombre de points. La première suite utilisée est une suite de Halton en dimension 20, notée H20(1) ayant pour bases les 20 premiers

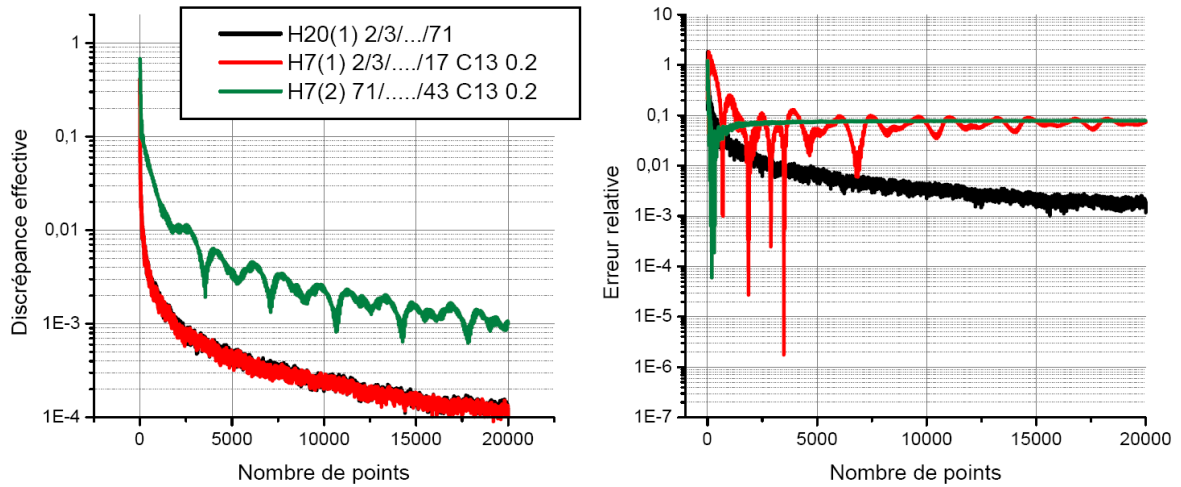


Figure 4.12 – Erreur relative et discr ance effective avec indices de Sobol fractionnaires erron s pour 3 suites de Halton en fonction du nombre de points.

entiers premiers 2; 3; ...; 71. La deuxi me suite, not e H7(1) est compos e d'une suite de Halton en dimension $s = 7$ ayant pour bases les 7 premiers entiers premiers pour les 7 variables dont les indices de Sobol fractionnaires sont les plus importants ($X^1, X^2, X^3, X^4, X^6, X^7, X^8$), les autres variables  tant fix es   une constante  gale   0,2. En particulier, la variable X^5 , significative mais ayant un indice de Sobol fractionnaire tr s faible, est fix e   0,2. La troisi me suite, not e H7(2) est compos e d'une suite de Halton en dimension $s = 7$ ayant pour bases les entiers premiers 71; 67; 61; 59; 53; 47; 43 pour les 7 variables dont les indices de Sobol fractionnaires sont les plus importants, les autres variables  tant fix es   une constante  gale   0,2. Alors que, avec la suite H7(1), la variable significative X^5 est fix e   une constante, la discr ance effective de la suite de Halton H7(1), est du m me ordre de grandeur que celle de la suite de Halton en dimension 20, H20(1). Ces deux discr ances effectives sont tr s inf rieures   celle de la suite de Halton H7(2), mal  chantillonn e sur les projections ayant un fort indice de Sobol fractionnaire. En revanche, l'erreur relative pour la suite de Halton H7(1) est du m me ordre de grandeur que celle de la suite de Halton H7(2), mal  chantillonn e sur les projections ayant un fort indice de Sobol fractionnaire. Nous pouvons ainsi constater que si les niveaux haut et bas d'une variable sont mal choisis

lors du calcul des indices de Sobol fractionnaires, en particulier si la variable est significative, la discr pance effective peut alors ne pas ˆtre corr l e   l'erreur d'int gration.

Nous avons mis en avant dans ce chapitre le rˆle important du choix des sous-ensembles u_i dans la d composition (3.1) pour la discr pance effective. Nous illustrons ce point   l'aide d'une fonction test h_4 d finie sur $[0, 1]^s$ par

$$\begin{aligned} h_4(X) = & f_4(X) - 31(2X^5 - 1)^2 + 2 \cdot 10^{-5}(2X^5 - 1) \\ & - 31(2X^1 - 1)(2X^3 - 1) + 31(2X^2 - 1)(2X^6 - 1)(2X^{11} - 1)(2X^{13} - 1) \\ & - 34(2X^2 - 1)(2X^4 - 1) + 34(2X^5 - 1)(2X^8 - 1)(2X^{14} - 1)(2X^{18} - 1) \end{aligned}$$

Cette fonction s'obtient   partir de la fonction f_4 en rempla ant le terme quadratique en X^5 par un terme lin aire en X^5 et en rempla ant chacune des deux interactions, entre X^1 et X^3 , et entre X^2 et X^4 , par une interaction d'ordre plus  lev e. L'interaction qui remplace celle entre X^1 et X^3 a  t  choisie de mani re   ce que, avec le plan factoriel fractionnaire utilis  dans le cadre du calcul des indices de Sobol fractionnaires de la fonction, elle soit un des alias de l'interaction entre X^1 et X^3 ,   savoir l'interaction entre X^2 , X^6 , X^{11} et X^{13} . De mˆme l'interaction entre X^2 et X^4 est remplac e par une interaction qui lui est alias e,   savoir l'interaction entre X^5 , X^8 , X^{14} et X^{18} .

La figure 4.13 pr sente les graphes de l'erreur d'int gration de $E(h_4(X))$,   droite, et celui de la discr pance effective,   gauche, en fonction du nombre de points pour les trois suites de l'exemple pr c dent. Sur la figure 4.13 la discr pance de la suite H20(1) est du mˆme ordre de grandeur que celle de la suite H7(1) alors que l'erreur de cette derni re est plus  lev e. Ceci illustre qu'un mauvais choix de sous-ensembles u_i peut conduire   un crit re non corr l    l'erreur d'int gration.

4.4 Conclusion

Nous avons d fini dans ce chapitre un nouveau crit re, la discr pance effective, permettant de juger la qualit  de r partition des projections significatives pour la fonction d'int rˆt. Ce crit re est une discr pance L_2 - toile pond r e o  les poids sont une approximation des

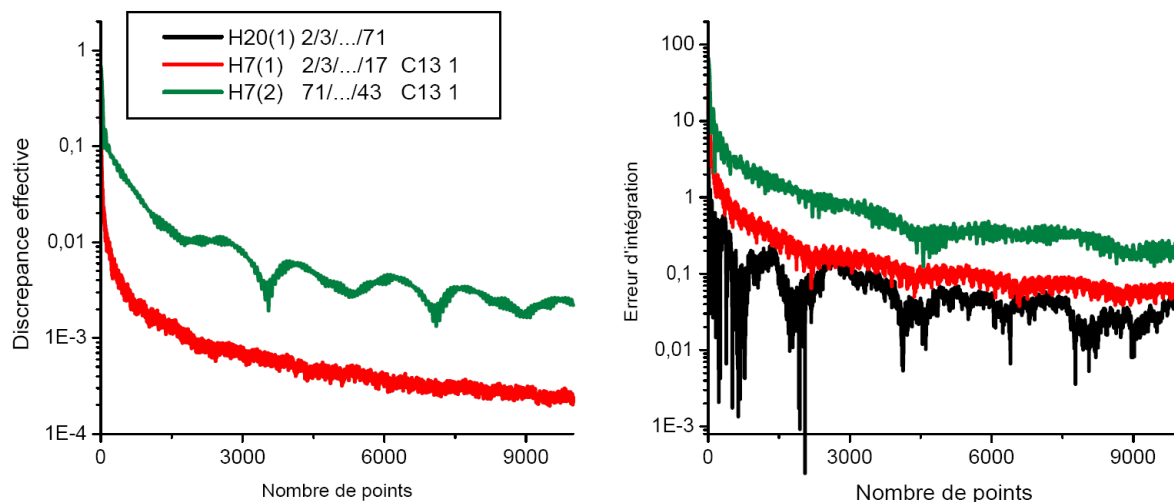


Figure 4.13 – Erreur et discr pance effective avec un choix des projections erron  pour 3 suites de Halton en fonction du nombre de points.

indices de Sobol. Nous avons mis en  vidence que ce crit re v rifiait l'in galit  de Koksma-Hlawka pond r e. Les tests num riques ont mis en  vidence la pertinence de la discr pance effective, m me dans le cas d'une fonction indicatrice, pour d crire l'ad quation d'une suite   la fonction d'int r t. Toutefois, la discr pance effective d pend des indices de Sobol fractionnaires. Or les indices de Sobol fractionnaires peuvent, dans certains cas,  tre une tr s mauvaise approximation des indices de Sobol. Ces cas correspondent aux fonctions dont la valeur est identique au niveau haut et au niveau bas d'un facteur significatif. Dans le cas test que nous avons pr sent , la forme analytique de h  tant connue explicitement, il est possible de contourner ce probl me en prenant un autre niveau haut et un autre niveau bas pour le facteur correspondant. Cependant, dans un cas r el, la forme analytique de la fonction est rarement explicitement connue. Par cons quent, il peut  tre difficile de pr dire un tel comportement. C'est pourquoi il peut  tre utile de tester la robustesse des indices de Sobol fractionnaires   l'aide d'une validation crois e, avant leur utilisation comme pond ration dans la discr pance effective. Dans le cas o  les indices de Sobol ne seraient pas robuste, il est possible d'utiliser les m thodes classiques d'estimation des indices de Sobol, telles que la m thode FAST ou la m thode de Sobol (notons que ces m thodes ne peuvent pas  tre

utilisée lorsque la dimension est élevée et que le nombre d'évaluations de la fonction est restreint). Les tests numériques ont également illustré l'importance du choix des projections constituant la discrédance effective. Ce choix doit être le plus plausible possible au regard de la fonction d'intérêt h . Si ce choix s'avère impossible en raison d'une trop grande méconnaissance de la fonction, il est possible de prendre les sous-ensembles de cardinal minimal. Ce choix revient à supposer que la fonction d'intérêt est de dimension effective faible au sens de la superposition. Et, en pratique, les interactions d'ordre élevé sont souvent négligeables.

Bien que la discrédance effective permette de distinguer la suite la plus adaptée à la fonction d'intérêt en terme de répartition des projections, parmi un ensemble de suites, elle ne permet pas de savoir si la suite est optimale pour notre fonction d'intérêt. C'est pourquoi nous avons souhaité construire une suite de points minimisant au mieux la discrédance effective.

CHAPITRE 5

DÉVELOPPEMENT D'UN ALGORITHME DE SÉLECTION DE POINTS ADAPTÉS À LA FONCTION D'INTÉRÊT

Nous avons à notre disposition un critère adapté à la fonction d'intérêt, la discrédance effective qui permet de choisir parmi un ensemble de suites, celle dont les projections sur des sous-espaces $[0, 1]^d$ de $[0, 1]^s$ de petite dimension $d \ll s$, significatives pour la fonction d'intérêt, sont bien échantillonnées. Cependant, la qualité de la suite retenue dépend de l'ensemble des suites dans lequel s'effectue le choix. C'est pourquoi nous souhaitons utiliser un algorithme d'optimisation pour construire une suite de points qui soit proche de l'optimalité en terme de discrédance effective. Nous espérons obtenir ainsi un estimateur de l'intégrale meilleur qu'avec les suites usuelles. Comme nous l'avons précisé au chapitre 2, la discrédance en norme L_2 -étoile d'une suite finie de n points, en tant que fonction de $[0, 1]^s$ dans \mathbb{R}^+ , admet de nombreux minima locaux. Un algorithme d'échange simple risque de renvoyer une suite de points dont la discrédance effective est faible, mais pas nécessairement la suite optimale pour la discrédance effective. Pour cette raison, nous utilisons un algorithme de recuit simulé pour lequel il existe des preuves de convergence asymptotique de la solution vers l'optimum global de la fonction que l'on cherche à optimiser. Toutefois, comme nous l'avons précisé au chapitre 2, cet algorithme peut être très long à s'exécuter. Changer le critère ne change pas cet état de fait, par conséquent nous nous limitons à des intégrandes de petite dimension et nous utilisons un nombre de points restreint. De plus, pour connaître le premier point, il est nécessaire d'attendre la fin de l'exécution de l'algorithme. Nous proposons donc une nouvelle méthode qui sélectionnera une suite de points pour laquelle la discrédance effective décroît rapidement en fonction de n . Contrairement aux algorithmes d'échange coûteux en temps, cette méthode sera utilisable en grande dimension. Nous l'appellerons méthode incrémentale car elle ne suppose pas n fixe.

Dans la section suivante, nous détaillons chacun des deux algorithmes, le critère à minimiser étant la discrédance effective dans les deux cas. Dans un premier temps (section 5.1.1), nous proposons un algorithme de recuit simulé pour la discrédance effective. Dans un deuxième temps (section 5.1.2) nous détaillons le principe de l'algorithme incrémental. Puis nous comparons les erreurs d'intégration obtenues sur différents cas test dans la section 5.2.

5.1 Optimisation de la discrédance effective

5.1.1 Recuit simulé pour la discrédance effective

L'algorithme de recuit simulé est basé sur une analogie entre les problèmes d'optimisation et le recuit physique des solides. Le recuit physique des solides est un processus qui alterne des cycles de refroidissement lent et de réchauffage (recuit) qui tendent à minimiser l'énergie du matériau. Transposé à un problème d'optimisation, le recuit simulé consiste à partir d'une solution initiale, puis à proposer une solution dans le voisinage de la solution initiale. Si la solution proposée diminue le critère (ou l'augmente selon l'optimum recherché), alors on accepte de l'échanger avec la solution initiale. Sinon, on accepte l'échange avec une certaine probabilité. Prendre une probabilité élevée permet d'explorer une plus grande partie de l'espace de solution et tend à éviter de s'enfermer trop vite dans la recherche d'un optimum local. Au contraire, prendre une probabilité faible amène à chercher l'optimum dans le voisinage de la solution de départ. Cependant, pour que l'algorithme tende vers une solution au moins localement optimale, il est nécessaire que la probabilité soit décroissante avec le nombre d'itérations. On introduit alors le paramètre température dont dépend la probabilité. A température élevée, la probabilité est grande, et à l'inverse, à température basse la probabilité tend vers zéro.

Pour optimiser la discrédance effective, à une température T donnée, la probabilité d'accepter une solution x' , qui a une discrédance effective $D_{eff}(x')$ plus élevée que la solution précédente x , est

$$q(T) = \exp\left(-\frac{D_{eff}(x') - D_{eff}(x)}{T}\right).$$

Cette règle de décision caractérise l'algorithme de recuit simulé. La procédure de recuit simulé

pour la discrédance effective est présenté dans l'algorithme 5.1. Il existe deux approches

Algorithme 5.1 : Recuit Simulé

Initialisation : Soit une solution initiale $x = (x_1, \dots, x_n)$, une suite de n points, quelconque de $[0, 1]^s$
 Calculer la discrédance effective associée $D_{eff}(x)$
 Fixer la température initiale T
tant que la solution n'a pas été modifiée sur B paliers consécutifs **faire**
 tant que on n'a pas fait G itérations **faire**
 Choisir un point x_i par tirage uniforme dans l'ensemble des points de la suite
 Simuler un point z_i de loi uniforme sur $[0, 1]^s$
 Calculer la discrédance effective $D_{eff}(z(i))$ de la suite finie $z(i) = (x_1, \dots, x_{i-1}, z_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$
 si $D_{eff}(x) > D_{eff}(z(i))$ **alors**
 accepter de remplacer le point x_i par le point z_i
 $x_i \leftarrow z_i$
 sinon
 accepter de remplacer x_i par z_i avec la probabilité $q(T)$
 $x_i \leftarrow z_i$ avec la probabilité $q(T)$
 fin si
 fin tant que
 Diminuer T
fin tant que

pour diminuer la température. La première consiste à diminuer la température par paliers, la température étant constante sur un palier de G itérations. Dans le deuxième cas, la température diminue de façon continue. La décroissance par paliers permet d'explorer un plus grand nombre de solutions à une température fixée. C'est pourquoi nous avons choisi ce mode de décroissance pour les tests numériques de la section 5.2. Quant à la vitesse de décroissance de la température, elle doit être suffisamment lente pour explorer l'espace des solutions, et suffisamment rapide pour obtenir une solution en un temps raisonnable. Pour les tests numériques de la section 5.2, nous avons choisi une vitesse de décroissance géométrique, à savoir $T_k = 0,85T_{k-1}$, où T_k est la température du $k^{\text{ème}}$ palier, le choix de 0,85 étant une valeur classique au regard de la littérature [PDDAP05]. La température initiale est un paramètre également déterminant pour l'efficacité du recuit simulé. Nous avons choisi, pour les exemples numériques, une température initiale égale à la discrédance effective de la solution initiale. De cette manière, si la discrédance effective de la solution initiale est déjà

très faible, alors la probabilité d'accepter une solution qui augmente la discrédance effective sera plus élevée et inversement. Ceci permet de s'éloigner de la solution initiale dans le cas où elle serait déjà proche d'un minimum local.

La longueur des paliers de température doit être suffisamment grande pour permettre une exploration de l'espace des solutions et suffisamment petite pour que l'algorithme s'exécute en un temps raisonnable. Nous avons ainsi pris une longueur égale à un centième des points de la solution initiale. Ceci signifie qu'à une température fixée, l'algorithme testera $G = n/100$ solutions. Ainsi, la solution obtenue à la dernière itération du palier de température diffèrera de la solution obtenue avant le changement de température, par environ un centième des points, ce qui nous a paru un bon compromis entre l'exploration du voisinage et le temps d'exécution. Enfin, la condition d'arrêt porte sur le nombre de paliers consécutifs sur lesquels la solution n'a pas été modifiée. Il paraît raisonnable de prendre un nombre de paliers qui augmente avec la dimension s , c'est-à-dire avec la difficulté du problème. Nous avons choisi d'arrêter l'algorithme lorsque la solution n'a pas été modifiée sur $B = s$ paliers consécutifs.

Contrairement à la plupart des algorithmes d'optimisation, pour le recuit simulé, il existe des preuves de convergence de la solution vers l'optimum global de la fonction que l'on cherche à optimiser. Toutefois, l'algorithme de recuit simulé peut être relativement long à s'exécuter. De plus, si l'on souhaite ajouter un point à la suite obtenue, pour s'assurer qu'elle correspond au moins à une suite localement optimale pour la discrédance effective, il est nécessaire de relancer à nouveau l'algorithme sur l'ensemble des points. C'est pourquoi nous avons tenté de mettre au point un algorithme incrémental permettant d'obtenir une suite proche de l'optimum au regard de la discrédance effective.

5.1.2 Algorithme incrémental sur critère de discrédance effective

Notre algorithme s'inspire de l'algorithme de recuit simulé. Plus précisément, supposons que l'on ait déjà construit une suite de points $x = (x_0, \dots, x_{n-1})$ de $[0, 1]^s$. Nous calculons la discrédance effective de cette suite $D_{eff}(x)$. Nous proposons d'ajouter à la suite x_0, \dots, x_{n-1} un nouveau point, x_n de $[0, 1]^s$. On calcule la discrédance $D_{eff}(x_0, \dots, x_{n-1}, x_n)$, de la suite constituée des n points x_0, \dots, x_{n-1}, x_n . Si ce point fait décroître suffisamment la discrédance

effective, on accepte x_n . Pour n fixé, la discrédance admet un grand nombre de minima locaux. De même, la discrédance, en tant que fonction de n et x , possède une infinité de minima locaux. C'est pourquoi nous ne rejetons pas systématiquement les points ne vérifiant pas la condition sur la décroissance de la discrédance. Nous acceptons x_n avec une certaine probabilité. Si le point est refusé, on propose un autre point x'_n et on le soumet aux tests précédents. On itère alors ce processus jusqu'à obtenir le nombre de points désiré ou jusqu'à ce que le nombre de points refusés dépasse un certain seuil. Cette procédure est présentée de manière plus formelle dans l'algorithme 5.2.

Algorithme 5.2 : Incrémental

Initialisation : Soit $x = x_0, \dots, x_{n-1}$ une suite de points de $[0, 1]^s$

Calculer la discrédance effective associée $D_{eff}(x)$

tant que la condition d'arrêt n'est pas vérifiée **faire**

 Simuler un point x_n de loi uniforme dans $[0, 1]^s$

 Calculer la discrédance $D_{eff}(x_0, \dots, x_{n-1}, x_n)$

si $D_{eff}(x) > k_i * D_{eff}(x_0, \dots, x_{n-1}, x_n)$ **alors**

 accepter le point x_n

$x \leftarrow (x_0, \dots, x_{n-1}, x_n)$

sinon

 accepter le point x_n avec la probabilité p_i

$x \leftarrow (x_0, \dots, x_{n-1}, x_n)$ avec la probabilité p_i

fin si

fin tant que

On peut imaginer différentes conditions d'arrêt de l'algorithme incrémental. Elles peuvent porter soit sur le nombre de points, soit sur une valeur de discrédance effective à atteindre, soit sur le nombre de points refusés. Ici, par simplicité, nous choisissons d'arrêter l'algorithme lorsqu'un nombre de points n a été atteint. La procédure présentée dans l'algorithme 5.2 est basée sur un choix aléatoire uniforme des points proposés, mais il est également envisageable de proposer des points issus d'une suite quasi-aléatoire. Dans la procédure décrite par l'algorithme 5.2 le choix du paramètre k_i , qui fixe la décroissance de la discrédance effective, et du paramètre p_i , qui fixe la probabilité d'accepter un point ne vérifiant pas la condition de décroissance, est déterminant pour l'efficacité de l'algorithme, à la fois en terme de qualité de la suite obtenue ainsi qu'en terme de temps d'exécution. Nous comparerons dans la section 5.2 plusieurs possibilités pour la décroissance k_i de la discrédance effective. La probabilité p_i

doit être, quant à elle, choisie de manière à décroître avec le nombre de points déjà acceptés. Le choix d'une probabilité qui décroît très rapidement avec le nombre de points acceptés augmente d'autant le nombre de points rejetés et donc le temps d'exécution de l'algorithme. Cependant, si la probabilité p_i est trop élevée et la décroissance k_i trop rapide, la sélection des points sera essentiellement due au hasard et n'apportera que peu de bénéfices, en terme d'erreur d'intégration, par rapport à une suite aléatoire uniforme.

Nous présentons dans la section suivante quelques résultats obtenus à l'aide de l'algorithme incrémental. En particulier, nous comparons l'erreur d'intégration des points sélectionnés par l'algorithme incrémental et l'algorithme de recuit simulé avec celle des suites quasi-aléatoires usuelles.

5.2 Résultats de tests numériques

Nous proposons dans cette section de comparer la qualité, en terme d'erreur d'intégration, des points sélectionnés par l'algorithme incrémental et des points sélectionnés par l'algorithme de recuit simulé à celle des points de suites quasi-aléatoires. Avant de lancer l'exécution de l'algorithme incrémental, il est nécessaire de fixer un certain nombre de paramètres : le type de points proposés, la vitesse de décroissance de la discrétance effective, la probabilité d'accepter un point ne vérifiant pas la condition de décroissance et enfin, la condition d'arrêt. Afin d'avoir une première idée quant à l'influence de chacun de ces paramètres, pour chacune des fonctions test, nous avons envisagé deux types de points proposés pour la procédure 5.2 : pseudo-aléatoire et quasi-aléatoire. Nous avons également envisagé deux vitesses de décroissance de la discrétance effective et pour chacune d'elle nous avons choisi une probabilité similaire. En revanche, par soucis de simplicité, nous avons choisi d'appliquer dans tous les cas le même type de condition d'arrêt, à savoir le nombre de points déjà sélectionnés.

5.2.1 Fonction quadratique

La première fonction sur laquelle nous avons choisi de tester l'algorithme incrémental est une fonction en dimension 30 possédant plusieurs interactions d'ordre 2, de manière à se rapprocher de la forme de la fonction représentant le code de calcul de SIR de l'Onera. Nous introduisons ainsi la fonction h_5 définie sur $[-1; 1]^{30}$ par

$$\begin{aligned}
 h_5(X) = & \sum_{j=1}^{10} (-1)^{j-1} j 10^{-3} X^j + \sum_{j=11}^{15} (-1)^{j-1} (j-9) 10^{-2} X^j + \sum_{j=16}^{20} (-1)^j j X^j \\
 & + 131X^{21} + 124X^{22} - 150X^{23} - 160X^{24} + 125X^{25} + 126X^{26} + 127X^{27} \\
 & + 128X^{28} + 140X^{29} + 130X^{30} \\
 & + 129X^{29} X^{30} - 132X^{27} X^{28} + 133X^{29} X^{26} - 134X^{25} X^{26} + 135X^{26} X^{27} + 1, 3
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Cette fonction est constituée de 10 variables très significatives X^{21}, \dots, X^{30} dont 6 présentant des interactions d'ordre 2 significatives X^{25}, \dots, X^{30} . Les 5 variables X^{16}, \dots, X^{20} sont moyennement significatives et les variables X^1, \dots, X^{15} n'influencent que très peu la fonction h_5 .

Supposons que l'on souhaite estimer l'intégrale $I = E(h_5) = 1,3$. Tout d'abord nous calculons les indices de Sobol fractionnaires de h_5 à l'aide d'un plan factoriel fractionnaire 2^{30-19} de résolution VI. Le modèle linéaire (3.3) qui a été utilisé est composé de $k = 465$ facteurs et interactions, à savoir les 30 facteurs et les 435 interactions d'ordre deux. Ensuite, la discrédance effective est définie comme la somme pondérée des 465 discrédances en norme L_2 -étoile des projections sur les sous-espaces correspondants aux 30 variables et aux 435 interactions d'ordre deux, où les poids sont les indices de Sobol fractionnaires.

Nous avons lancé l'algorithme incrémental 5.2 avec pour suite initiale le point x_0 , un point simulé selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. De même, les points proposés sont simulés de manière indépendante selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. Nous avons utilisé pour cette première simulation les valeurs $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$. Le choix de $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ est motivé par l'heuristique suivante. Nous avons précisé au chapitre 2, que la discrédance infinie d'une suite aléatoire uniforme $x(n) = (x_1, \dots, x_n)$, de n points était en $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$. On s'attend alors

à ce que le rapport des discrédance infinies $D_{\infty,*}(x(n-1))$ et $D_{\infty,*}(x(n))$ des suites $x(n-1) = (x_1, \dots, x_{n-1})$ et $x(n) = (x_1, \dots, x_n)$, décroisse de manière équivalente à $\frac{\sqrt{n-1}}{\sqrt{n}}$. Ainsi, pour assurer une décroissance de la discrédance effective des points sélectionnés par notre algorithme, au moins équivalente à celle que l'on pourrait attendre de la discrédance infinie d'une séquence aléatoire uniforme, nous avons utilisé pour cette première simulation la valeur $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$. Pour le choix de la probabilité p_i , nous souhaitons qu'elle décroisse rapidement avec le nombre de points déjà sélectionnés tout en étant élevée lorsque le nombre de points déjà sélectionnés est faible. Ainsi nous avons choisi de manière arbitraire $p_i = \frac{50}{i}$. La figure 5.1 illustre l'évolution de l'erreur d'intégration en fonction du nombre de points, pour une suite de Faure en base $b = 31$, une suite de Halton ayant pour bases les 30 premiers entiers premiers, une suite de Sobol et la sélection des points obtenus avec l'algorithme 5.2. L'erreur d'intégration que nous avons choisi de tracer, est en réalité l'erreur relative (figure 5.1(a)), c'est-à-dire l'erreur divisée par la valeur exacte de l'intégrale $I = 1,3$. Pour des raisons de lisibilité, nous avons également tracé sur la figure 5.1(b) la moyenne glissante, notée moygliE, de l'erreur d'intégration relative définie pour tout entier m , $1 \leq m \leq n$ par

$$\text{moygliE}(m) = \frac{\sum_{i=1}^{500} |I - I_{m-i+1}^{QMC}|}{500I}.$$

Nous pouvons constater sur la figure que 5.1(a), que l'erreur d'intégration pour la fonction polynomiale h_5 avec les points sélectionnés par notre algorithme est équivalente à celle de la suite de Sobol qui est, sur cet exemple, la meilleure suite quasi-aléatoire testée. Au regard de la moyenne glissante (figure 5.1(b)), nous pouvons constater que, en moyenne, l'erreur d'intégration de la sélection des points par notre algorithme est légèrement meilleure que celle de la suite de Sobol. Ainsi, avec des points proposés de manière indépendante uniforme l'erreur d'intégration obtenue est relativement satisfaisante.

Nous souhaitons connaître l'impact des points proposés dans l'algorithme 5.2 sur la suite sélectionnée finale. Pour cela, nous avons lancé notre algorithme avec les mêmes paramètres que dans le cas précédent, mais cette fois-ci x_0 est le premier point d'une suite quasi-aléatoire de $[-1, 1]^{30}$ et les points proposés sont les points de la même suite quasi-aléatoire sur $[-1, 1]^{30}$,

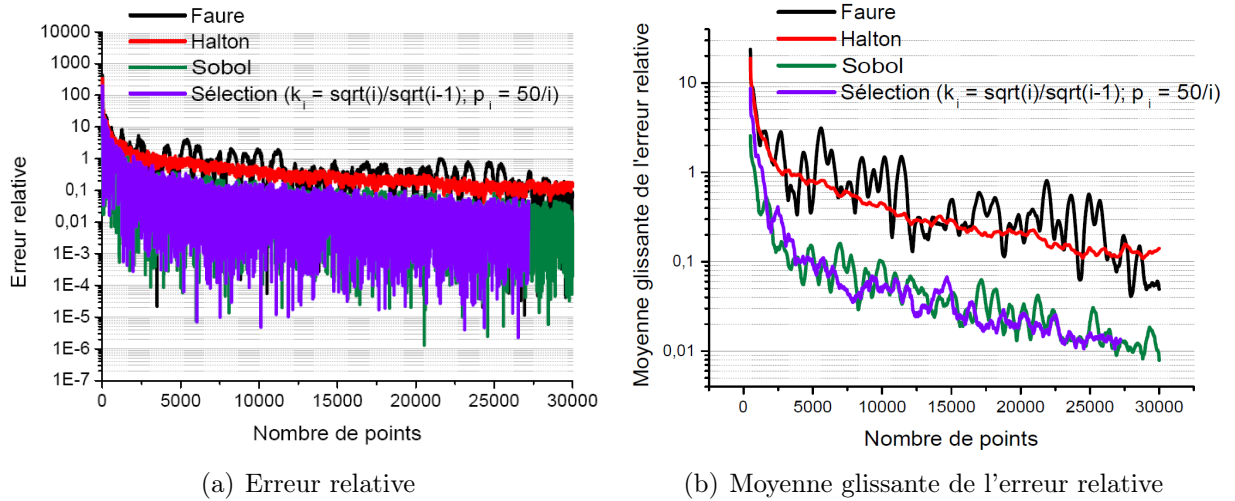
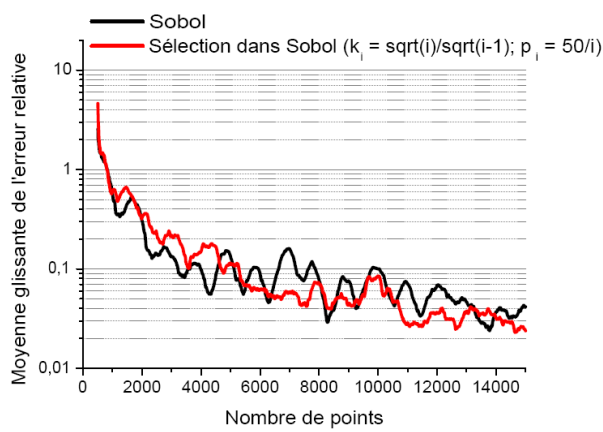


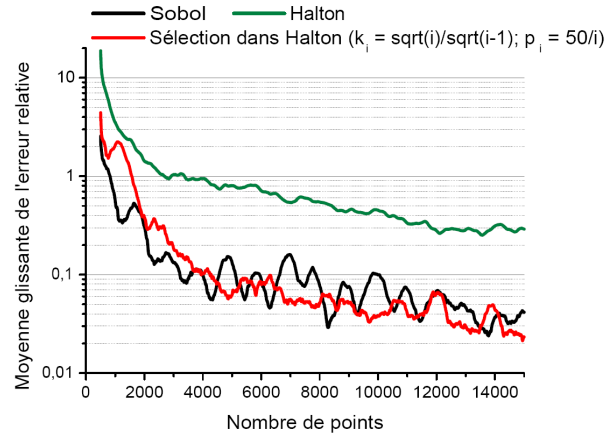
Figure 5.1 – Erreur relative et moyenne glissante de l'erreur relative des points sélectionnés par l'algorithme 5.2 avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$

proposés dans l'ordre de leur construction.

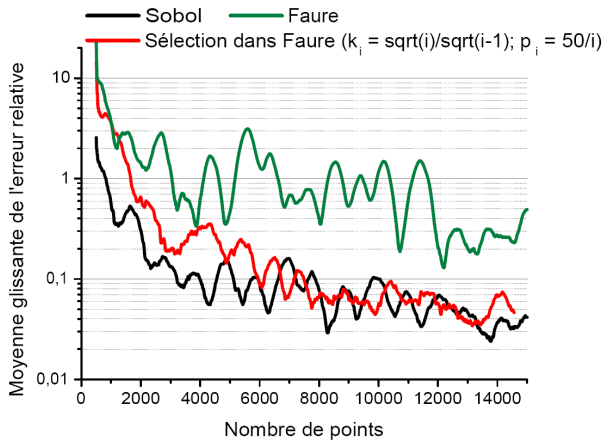
La figure 5.2 illustre le comportement de la moyenne glissante de l'erreur d'intégration relative des points sélectionnés par l'algorithme 5.2 dans plusieurs suites quasi-aléatoires. La première suite quasi-aléatoire que nous avons utilisée pour l'exécution de l'algorithme est une suite de Sobol (figure 5.2(a)). Dans un second temps, nous avons utilisé les points d'une suite de Halton ayant pour base les 30 premiers entiers premiers dans l'ordre décroissant (figure 5.2(b)). De même, la figure 5.2(c) illustre la moyenne glissante de l'erreur d'intégration relative avec les points sélectionnés par l'algorithme 5.2, où cette fois-ci les points proposés durant la procédure sont ceux de la suite de Faure en base $b = 31$. Enfin, nous avons également proposés des points issus d'une suite de Halton ayant pour base les 30 premiers entiers premiers dans l'ordre croissant (figure 5.2(d)), de manière à ce que les variables significatives soient mal échantillonnées. Dans chacun des cas, nous comparons la moyenne glissante de l'erreur d'intégration relative de la sélection à celle de la suite de Sobol, qui est la suite quasi-aléatoire ayant la plus faible erreur d'intégration parmi les suites testées, et à celle de la suite dans laquelle l'algorithme 5.2 a sélectionné les points. Nous pouvons observer sur la figure 5.2(d), que les points sélectionnés dans la suite de Halton ayant pour bases les 30



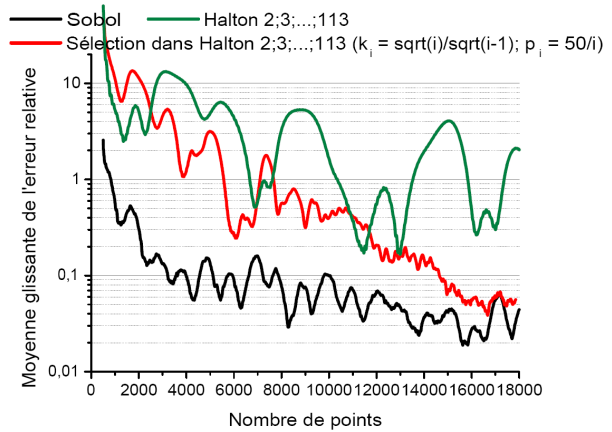
(a) Sélection dans une suite de Sobol



(b) Sélection dans une suite de Halton



(c) Sélection dans une suite de Faure



(d) Sélection dans une suite de Halton

Figure 5.2 – Erreur relative et discrédance effective des points sélectionnés par l’algorithme 5.2 avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$ où les points proposés sont ceux d’une suite quasi-aléatoire

premiers entiers premiers dans l’ordre croissant, présentent une erreur d’intégration moyenne du même ordre de grandeur que celle de la suite de Sobol lorsque le nombre de points est supérieur à 16000. Sur la figure 5.2(c), les points sélectionnés dans la suite de Faure en base $b = 31$, présentent une erreur d’intégration moyenne du même ordre de grandeur que celle de la suite de Sobol lorsque le nombre de points est supérieur à 6000. En revanche, nous pouvons constater sur les figures 5.2(a) et 5.2(b) que les points sélectionnés par notre algorithme dans la suite de Sobol et la suite de Halton respectivement, présentent une erreur d’intégration

moyenne légèrement plus faible que celle de la suite de Sobol à partir du moment où le nombre de points est supérieur à 5000. De plus, nous pouvons remarquer que, dans les trois cas, l'erreur d'intégration des points sélectionnés par notre algorithme dans une suite quasi-aléatoire est en moyenne plus faible que celle de la suite quasi-aléatoire dans laquelle les points ont été sélectionnés.

Ainsi, l'algorithme incrémental, avec pour paramètres $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$, permet, dans le cas de la fonction polynomiale que nous avons testée, d'obtenir une erreur d'intégration significativement meilleure que celle obtenue avec la suite dans laquelle les points ont été sélectionnés. De plus, les points ainsi sélectionnés permettent d'obtenir une erreur d'intégration au pire équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. Enfin, au vu des résultats numériques que nous avons obtenus, plus les points proposés présentent une erreur d'intégration élevée, et plus le nombre de points à sélectionner par l'algorithme 5.2 devra être important pour obtenir une erreur d'intégration équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire.

Dans le but d'étudier l'impact du choix du paramètre de décroissance k_i dans l'algorithme incrémental 5.2, nous avons envisagé une deuxième décroissance plus sévère que la précédente, à savoir $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$. Nous avons pris une probabilité d'acceptation similaire à la précédente, à savoir $p_i = 60/i$. Nous avons lancé l'algorithme incrémental 5.2 avec pour suite initiale le point x_0 , un point simulé selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. De même, les points proposés sont simulés de manière indépendante selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. La figure 5.3(a) illustre l'évolution de l'erreur d'intégration relative en fonction du nombre de points, pour une suite de Sobol et la sélection des points obtenue avec l'algorithme 5.2. Afin de faciliter la lecture des résultats, nous avons choisi de tracer la moyenne glissante de l'erreur relative pour ces mêmes suites sur la figure 5.3(b). Nous pouvons constater sur ces deux figures que la sélection de points obtenue à l'aide de l'algorithme incrémental est une nouvelle fois meilleure que la meilleure suite quasi-aléatoire testée. En revanche, il semble que le changement de vitesse de décroissance de la discrétisation effective ne permet pas, pour cette fonction test, d'obtenir de meilleurs résultats que la sélection avec la vitesse de décroissance précédente lorsque les points proposés sont issus d'un tirage aléatoire uniforme.

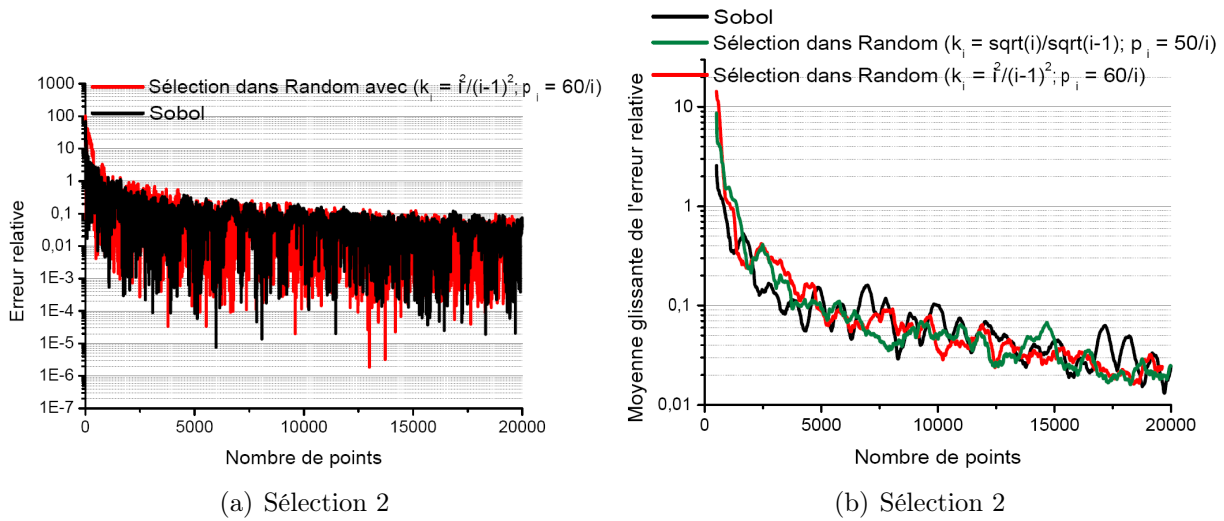
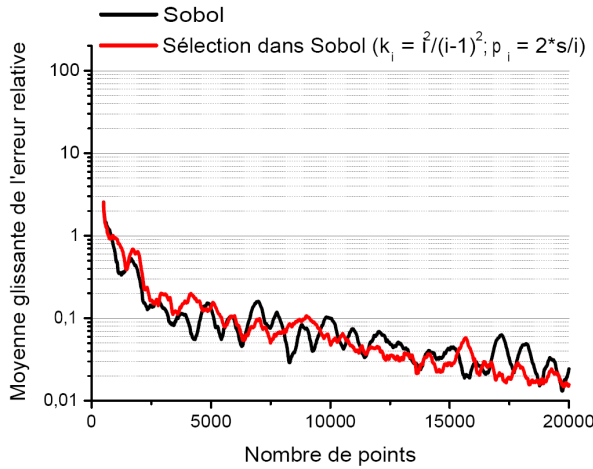
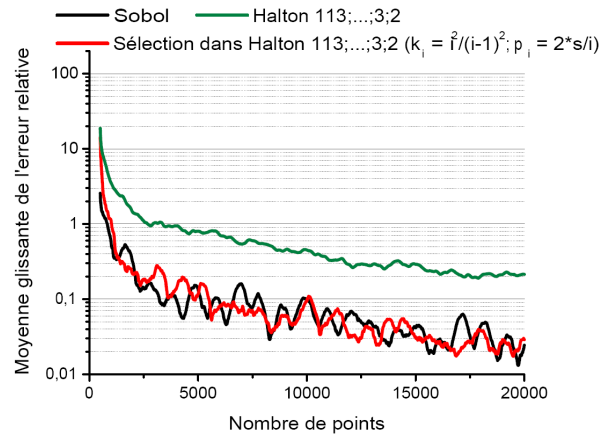


Figure 5.3 – Erreur relative et moyenne glissante de l’erreur relative des points sélectionnés par l’algorithme 5.2 avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{60}{i}$

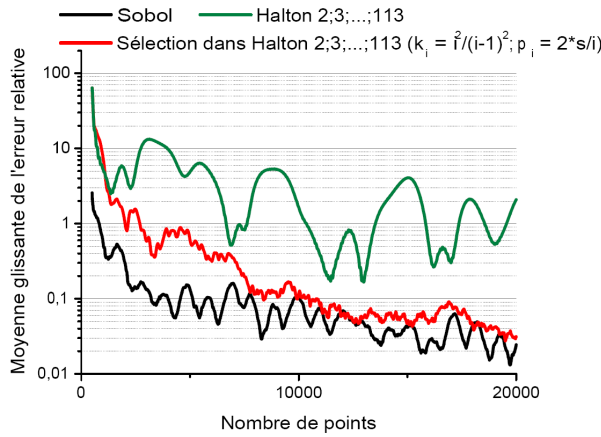
Nous avons par la suite utilisée la même vitesse de décroissance de la discrédance effective ($k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$), mais cette fois-ci les points proposés sont issus de suites quasi-aléatoires. La figure 5.4 illustre le comportement de la moyenne glissante de l’erreur d’intégration relative des points sélectionnés par l’algorithme 5.2 dans plusieurs suites quasi-aléatoires. La première suite quasi-aléatoire que nous avons utilisée pour l’exécution de l’algorithme est une suite de Sobol (figure 5.4(a)), la deuxième une suite de Halton ayant pour base les 30 premiers entiers premiers dans l’ordre décroissant (figure 5.4(b)), la troisième est une suite de Halton ayant pour base les 30 premiers entiers premiers dans l’ordre croissant (figure 5.4(c)), et enfin, nous avons utilisé une suite de Faure en base $b = 31$ (figure 5.4(c)). Dans chacun des cas, nous comparons la moyenne glissante de l’erreur d’intégration relative de la sélection à celle de la suite de Sobol qui est la suite quasi-aléatoire ayant la plus faible erreur d’intégration parmi les suites testées et à celle de la suite dans laquelle l’algorithme 5.2 a sélectionné les points. Nous pouvons observer sur la figure 5.2(c), que les points sélectionnés dans la suite de Halton ayant pour bases les 30 premiers entiers premiers dans l’ordre croissant, présentent une erreur d’intégration moyenne supérieure à celle de la suite de Sobol. Toutefois, à partir de $n = 10000$, l’erreur d’intégration relative avec la sélection des points par la procédure



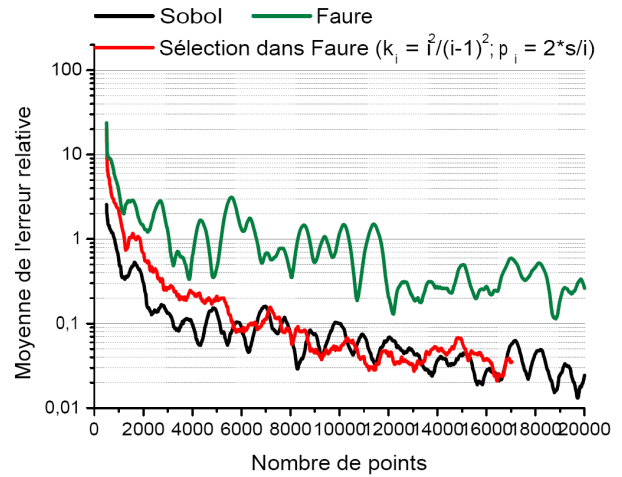
(a) Sélection dans une suite de Sobol



(b) Sélection dans une suite de Halton



(c) Sélection dans une suite de Halton



(d) Sélection dans une suite de Faure

Figure 5.4 – Erreur relative des points sélectionnés par l’algorithme 5.2 avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2*s}{i}$ où les points proposés sont ceux d’une suite quasi-aléatoire

5.2, est en moyenne très proche du maximum de celle obtenue avec la suite de Sobol. En revanche, nous pouvons constater sur les figures 5.2(a) et 5.2(b) que les points sélectionnés par notre algorithme dans la suite de Sobol et la suite de Halton respectivement, présentent une erreur d’intégration moyenne légèrement plus faible que celle obtenue avec la suite de Sobol à partir du moment où le nombre de points est supérieur à 5000. De plus, nous pouvons remarquer que, dans les trois cas, l’erreur d’intégration des points sélectionnés par

notre algorithme dans une suite quasi-aléatoire est en moyenne plus faible que celle de la suite quasi-aléatoire dans laquelle les points ont été sélectionnés. Ainsi, l'algorithme incrémental, avec pour paramètres $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2^*s}{i}$, permet dans le cas d'une fonction polynomiale, d'obtenir une erreur d'intégration significativement meilleure que celle obtenue avec la suite dans laquelle les points ont été sélectionnés. De plus, les points ainsi sélectionnés permettent d'obtenir une erreur d'intégration au pire légèrement supérieure à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. L'amélioration apportée par cette vitesse de décroissance par rapport à la vitesse $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$, est d'autant plus visible que la suite dans laquelle les points ont été sélectionnés présente une erreur d'intégration élevée. En effet, le nombre de points nécessaire pour obtenir une erreur relative moyenne égale à l'erreur relative moyenne maximale de la meilleure suite quasi-aléatoire testée est inférieur à celui nécessaire dans le cas de $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$.

Ainsi, à l'aide de l'algorithme incrémental, dans le cas d'une fonction polynomiale, nous parvenons à une erreur d'intégration significativement meilleure que celle obtenue avec de la suite dans laquelle les points ont été sélectionnés. De plus, les points ainsi sélectionnés permettent d'obtenir une erreur d'intégration au pire équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée.

Rappelons que pour le cas de l'Onera, nous souhaitons estimer une probabilité. Par conséquent, la fonction d'intérêt est une indicatrice. C'est pourquoi nous avons choisi pour deuxième fonction test le cas d'une indicatrice.

5.2.2 Indicatrice en petite dimension

Nous reprenons ici la fonction h_2 définie sur $[0, 1]^6$ introduite au chapitre précédent (4.3)

$$h_2(X) = \mathbb{I}_{\{-6,5 \cdot 10^{-5} - 2X^1 - 68X^2 + 2X^3 - 68X^4 + 4 \cdot 10^{-5}X^5 + 3 \cdot 10^{-4}X^6 + 136X^2X^4 < -40\}}(X) \quad (5.2)$$

Nous calculons les indices de Sobol fractionnaires du polynôme

$$f_2(X) = -6,5 \cdot 10^{-5} - 2X^1 - 68X^2 + 2X^3 - 68X^4 + 4 \cdot 10^{-5}X^5 + 3 \cdot 10^{-4}X^6 + 136X^2X^4.$$

qui sont ensuite utilisés comme pondération pour la discrédance effective associée à la fonction h_2 . La figure 5.5 illustre l'évolution de la discrédance effective (figure 5.5(a)) ainsi que celle de l'erreur d'intégration (figure 5.5(b)) en fonction du nombre de points, pour une suite de Faure en base $b = 7$, une suite de Halton ayant pour bases les 6 premiers entiers premiers et la sélection des points obtenus avec l'algorithme 5.2 où $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$. L'erreur d'intégration que nous avons choisie de tracer est en réalité l'erreur relative, c'est-à-dire l'erreur divisée par la valeur exacte de l'intégrale $I = 0,26$.

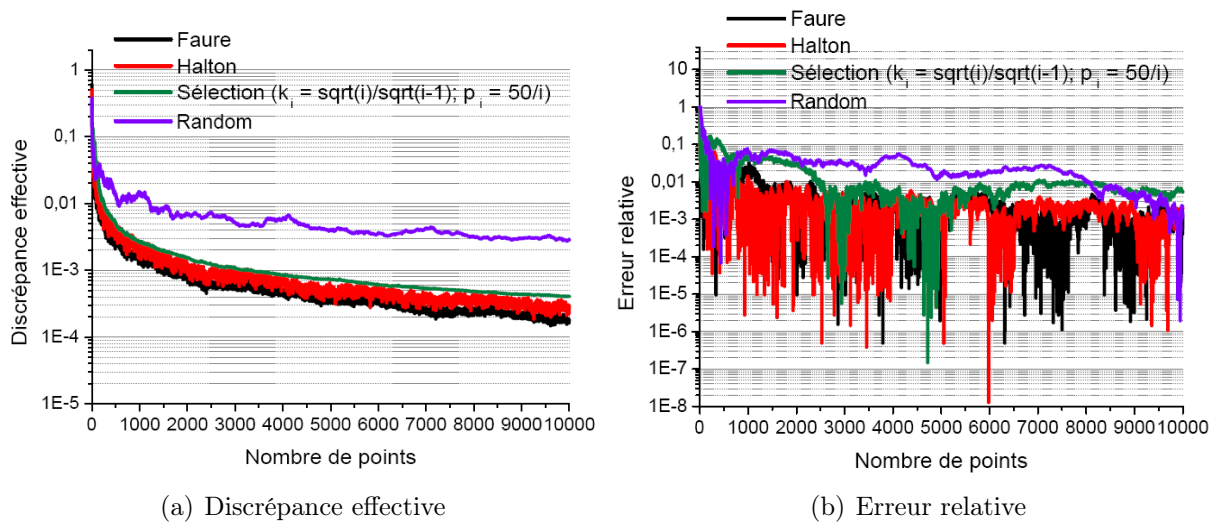
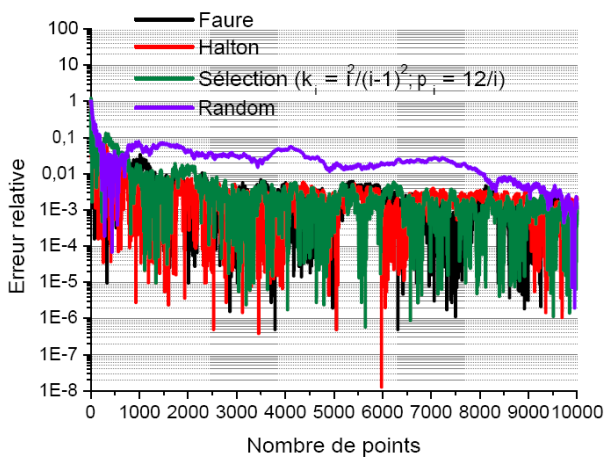


Figure 5.5 – Erreur relative et discrédance effective des points sélectionnés par l'algorithme 5.2 avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$

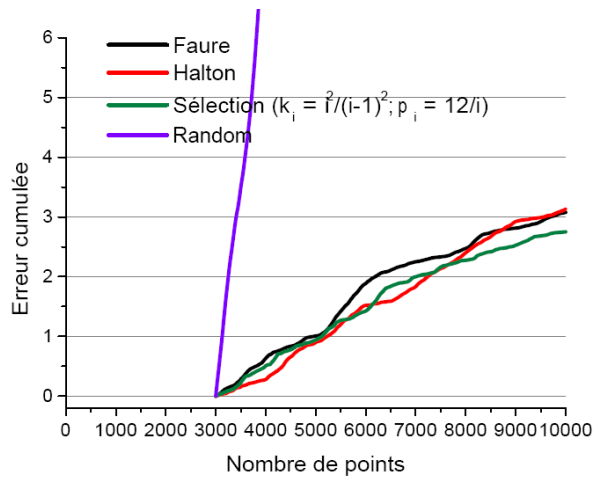
Dans le cas de cette fonction indicatrice, les points obtenus à l'aide de l'algorithme incrémental avec une décroissance de la discrédance en $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et une probabilité d'acceptation égale à $p_i = \frac{50}{i}$, ne semblent pas donner de meilleurs résultats que les suites quasi-aléatoires usuelles, en terme d'erreur d'intégration. Cependant, nous sommes en présence d'une fonction en petite dimension. Par conséquent, les suites quasi-aléatoires usuelles ne présentent pas d'irrégularités de répartitions sur les projections. De plus, du fait de cette petite dimension, le nombre de points nécessaire pour échantillonner raisonnablement l'espace $[0, 1]^s$ est moins important qu'en grande dimension. La probabilité $p_i = \frac{50}{i}$ risque alors d'être trop élevée pour le nombre de points désiré. Nous avons donc effectué une sélection de points avec

une décroissance plus contraignante, à savoir $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et nous avons également adapté la probabilité en posant $p_i = \frac{2^*s}{i}$. Nous pouvons ainsi observer sur la figure 5.6, que l'erreur d'intégration relative (figure 5.5(b)) des points sélectionnés avec l'algorithme incrémental où $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2^*s}{i}$, est au moins équivalente à celle des suites quasi-aléatoire usuelles ne présentant pas d'irrégularité sur les projections significatives. Pour des raisons de lisibilité, nous avons également tracé sur la figure 5.6(b) l'erreur d'intégration cumulée définie pour tout entier m , $3000 \leq m \leq n$ par

$$E_{cum}(m) = \sum_{i=3000}^m |I - I_m^{QMC}|.$$



(a) Erreur relative



(b) Erreur cumulée

Figure 5.6 – Erreur d'intégration relative et moyenne glissante de l'erreur avec les points sélectionnés par l'algorithme 5.2 où $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{12}{i}$

Bien que l'erreur d'intégration de notre sélection de points soit meilleure que celle des autres suites quasi-aléatoires, la figure 5.7 met en évidence le fait que la discrétance effective de la sélection des points par l'algorithme incrémental est supérieure à celle des autres suite quasi-aléatoires. Cette observation nous laisse penser qu'il est possible de minimiser davantage la discrétance effective. Malheureusement, dans le cadre d'une application, l'erreur d'intégration est inconnue. En raison de ce comportement de la discrétance effective, il n'est

pas possible de déterminer si la sélection des points obtenue par l'algorithme 5.2 sera plus efficace en terme d'erreur d'intégration que les suites quasi-aléatoires déjà très performantes. En revanche pour la comparaison avec des suites non adaptée à la fonction d'intérêt, telle qu'une suite quasi-aléatoire présentant des irrégularités de répartitions sur les projections significatives, la discrédance effective de la sélection de point reste un bon indicateur de performance en terme d'erreur d'intégration.

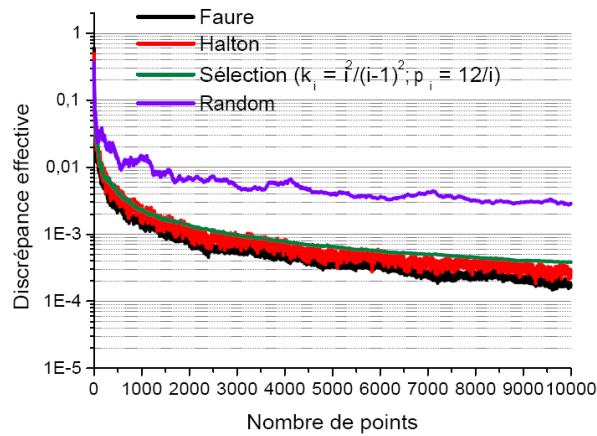


Figure 5.7 – Discrédance effective des points sélectionnés par l'algorithme 5.2 où $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{12}{i}$

Cette fonction étant en petite dimension, nous avons pu exécuter l'algorithme de recuit simulé 5.1 avec pour critère la discrédance effective. Nous avons pris pour suite initiale une suite pseudo-aléatoire de $n = 1000$ points. La température initiale est égale à la discrédance effective de la suite initiale. L'algorithme s'arrête lorsque le nombre de paliers consécutifs B sur lesquels la solution n'a pas été modifiée est égal à $B = 6$. La longueur d'un palier est égale à $G = n/100 = 10$. Les points que nous proposons à chaque étape pour l'échange sont tirés de manière aléatoire uniforme indépendante. La probabilité $q(T)$ d'accepter l'échange entre la suite $x = (x_1, \dots, x_n)$ et $z(i) = (x_1, \dots, x_{i-1}, z_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$ qui augmente la discrédance effective est égale à

$$q(T) = \exp\left(\frac{D_{eff}(x) - D_{eff}(z(i))}{T}\right).$$

Enfin, à chaque palier la température diminue selon un schéma géométrique

$$T_{k+1} = 0,85T_k$$

où T_k est la température du $k^{\text{ème}}$ palier.

Afin de s'assurer que la minimisation de la discrédance effective permet d'obtenir de meilleurs résultats en terme d'erreur d'intégration, que la minimisation d'une autre discrédance, nous avons comparé l'erreur d'intégration obtenue après minimisation de la discrédance effective et après minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. Nous rappelons que la discrédance en norme L_2 -étoile, par définition, privilégie les points du cube unité $[0, 1]^s$ proche du point $(1, \dots, 1)$ ([Mat98]). Toutefois, comme nous sommes en présence d'une fonction définie sur un espace de petite dimension, ce phénomène est moins marqué. Nous pouvons donc utiliser la discrédance en norme L_2 -étoile. Nous avons exécuté 100 fois l'algorithme de recuit simulé avec pour critère la discrédance en norme L_2 -étoile, et 100 fois avec pour critère la discrédance effective. Nous avons représenté sur la figure 5.8, les quantiles à 10, 25, 50, 75 et 90% des 100 observations de l'erreur relative des 1000 points après recuit simulé pour chacun des critères.

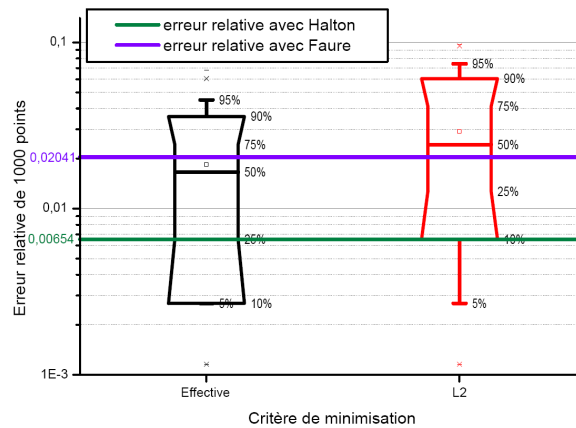


Figure 5.8 – Box Plot de l'erreur relative de 1000 points optimisés selon l'algorithme de recuit simulé avec pour critère la discrédance effective et la discrédance en norme L_2

Nous pouvons constater sur la figure 5.8 que la moyenne des erreurs d'intégration rela-

tives des 1000 points pour la minimisation de la discrédance effective est de 0,018 contre 0,029 dans le cas de la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. Cette figure met également en évidence que, parmi les 100 exécutions du recuit simulé avec la discrédance effective, entre 50% et 75 % des erreurs relatives observées sont inférieures à l'erreur d'intégration relative obtenue avec 1000 points d'une suite Faure en base $b = 7$, à savoir 0,02041 (ligne horizontale en violet figure 5.8) et au moins 25% sont inférieures à l'erreur d'intégration relative obtenue avec 1000 points d'une suite Halton ayant pour bases les 6 premiers entiers premiers $(b_1, \dots, b_6) = (2, 3, 5, 7, 11, 13)$, à savoir 0,00654 (ligne horizontale en vert figure 5.8). En comparaison, parmi les 100 exécutions du recuit simulé avec la discrédance en norme L_2 , moins de 50% des erreurs relatives observées sont inférieures à celle obtenue avec 1000 points d'une suite Faure en base $b = 7$, et environ 10% sont inférieures à celle obtenue avec 1000 points d'une suite Halton. Ainsi, la minimisation de la discrédance effective permet d'obtenir une erreur d'intégration relative moyenne plus faible que la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. De plus, la proportion des suites obtenues après avoir minimisé la discrédance effective, présentant une erreur d'intégration plus faible que celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée, est nettement supérieure que dans le cas de la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. Toutefois, les paramètres de l'algorithme de recuit simulé ont été choisis de manière à ce que l'algorithme s'arrête relativement rapidement. Nous pouvons donc espérer qu'en le laissant s'exécuter plus longtemps, l'algorithme renverra une proportion plus élevée de suites dont l'erreur d'intégration relative est inférieure à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée.

La comparaison entre les résultats obtenus à l'aide de l'algorithme de recuit simulé et ceux obtenus à l'aide de notre algorithme incrémental s'avère difficile. Dans le cas du recuit simulé, le nombre de points étant fixé, la minimisation de la discrédance effective sera réalisée pour ce nombre de points. En revanche, notre algorithme incrémental n'est pas destiné à minimiser la discrédance effective d'un nombre de points fixé. Lorsque le nombre de points est faible, il est nécessaire d'ajuster la probabilité p_i de manière à ce qu'elle soit très faible lorsqu'on s'approche du nombre de points désiré. Cependant, même si la probabilité est très faible, en raison des oscillations de l'erreur d'intégration que nous avons commentées à la section 4.3.1, il n'est pas possible de garantir un minimum pour n fixé.

En petite dimension, les suites quasi-aléatoires usuelles peuvent être choisie de manière à ce que leurs projections sur des sous-espaces de dimension inférieure à la dimension initiale ne présentent pas d'irrégularités de répartition. Par conséquent, en petite dimension, l'amélioration de l'erreur d'intégration est très difficile. De plus, le cas d'application de l'Onera est de dimension supérieure. C'est pourquoi nous avons choisi de tester l'algorithme incrémental sur une indicatrice en plus grande dimension.

5.2.3 Indicatrice en grande dimension

L'intégrale de la fonction indicatrice que nous avons choisie est égale à la probabilité que h_5 soit inférieure à un seuil fixé. Plus précisément, soit h_6 définie sur $[-1, 1]^{30}$ par

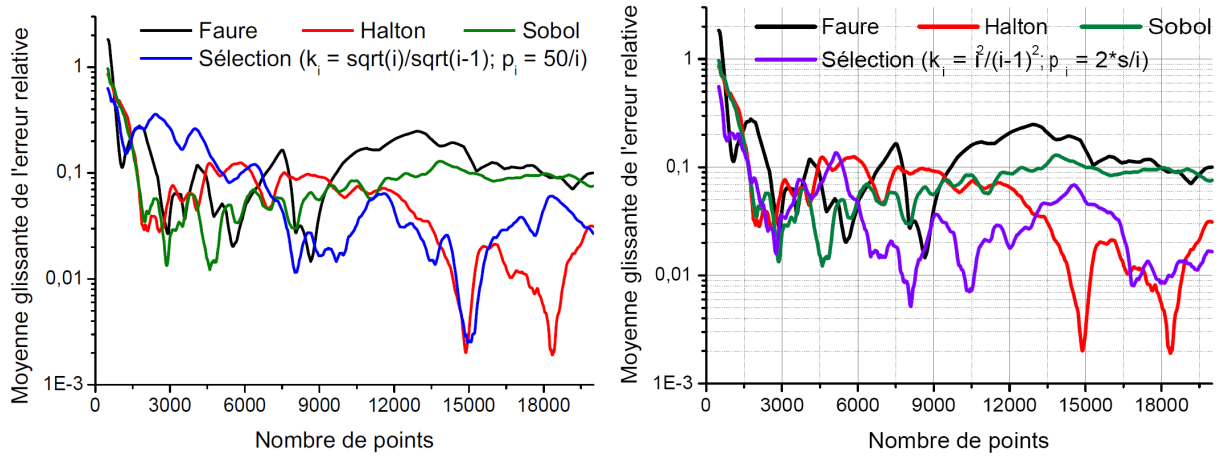
$$h_6(X) = \mathbb{1}_{\{h_5(X) < -600\}}(X) \quad (5.3)$$

L'intégrale $I = E(h_6(X))$ est une probabilité, elle est donc comprise entre 0 et 1. Plus la valeur de I est proche de 0 ou de 1 et plus la probabilité à estimer se rapproche de celle d'un évènement rare. Nous avons estimé $I = E(h_6(X))$ à l'aide d'une suite de Sobol de un million de points et elle vaut approximativement 0,0098, ce qui est faible. Comme nous l'avons expliqué dans la section 4.3.2, nous utilisons les indices de Sobol fractionnaires de h_5 . Nous avons lancé l'algorithme incrémental 5.2 avec pour suite initiale le point x_0 , un point simulé selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. De même, les points proposés sont simulés de manière indépendante selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^{30}$. Nous avons tracé sur la figure 5.9 la moyenne glissante de l'erreur d'intégration relative relative définie pour tout entier m , $500 \leq m \leq n$ par

$$\text{moygliE}(m) = \frac{\sum_{i=1}^{500} |I - I_{m-i+1}^{QMC}|}{500I}.$$

Nous avons comparé les moyenne glissantes de l'erreur relative d'une suite de Faure en base $b = 31$, d'une suite de Halton ayant pour bases les 30 premiers entiers premiers dans l'ordre décroissant, et d'une suite de Sobol avec la suite de points sélectionnée par notre algorithme. Les paramètres utilisés pour notre algorithme sont tout d'abord $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (figure

5.9(a)) puis $(k_i; p_i) = \left(\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i}\right)$ (figure 5.9(b)).



(a) Moyenne glissante pour $(k_i; p_i) = \left(\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i}\right)$ (b) Moyenne glissante pour $(k_i; p_i) = \left(\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i}\right)$

Figure 5.9 – Moyenne glissante de l'erreur relative avec les points sélectionnés par l'algorithme 5.2 où $(k_i; p_i) = \left(\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i}\right)$ et $(k_i; p_i) = \left(\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i}\right)$

Tout d'abord, nous pouvons constater sur la figure 5.9(a) que l'erreur relative moyenne obtenue avec 20000 points d'une suite de Sobol ou d'une suite de Faure est de 10 % et de 3% avec une suite de Halton. Ces valeurs élevées de l'erreur relative s'expliquent par le fait que la valeur de l'intégrale à estimer est très faible. L'estimation de cette intégrale est donc un problème difficile. Nous pouvons observer sur la figure 5.9(a), que notre algorithme, avec une décroissance de la discrétion effective équivalente à celle que l'on peut attendre de la discrétion infinie d'une suite aléatoire uniforme, permet d'obtenir, en moyenne, entre $n = 8000$ et $n = 16000$ une erreur équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire usuelle. Lorsque n est supérieure à 16000 l'erreur relative des points sélectionnés est supérieure à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire usuelle. En revanche, lorsque la décroissance imposée à la discrétion effective est plus rapide (figure 5.9(b)), nous obtenons une suite de points significativement meilleure, en terme d'erreur d'intégration, que celle des suites quasi-aléatoires usuelles entre $n = 6000$ et $n = 13000$. Ainsi une décroissance imposée à la discrétion effective plus sévère, permet d'obtenir une suite de points significativement meilleure, en terme d'erreur d'intégration, que celle des suites quasi-aléatoires usuelles lorsque

la valeur de l'intégrale à estimer est faible.

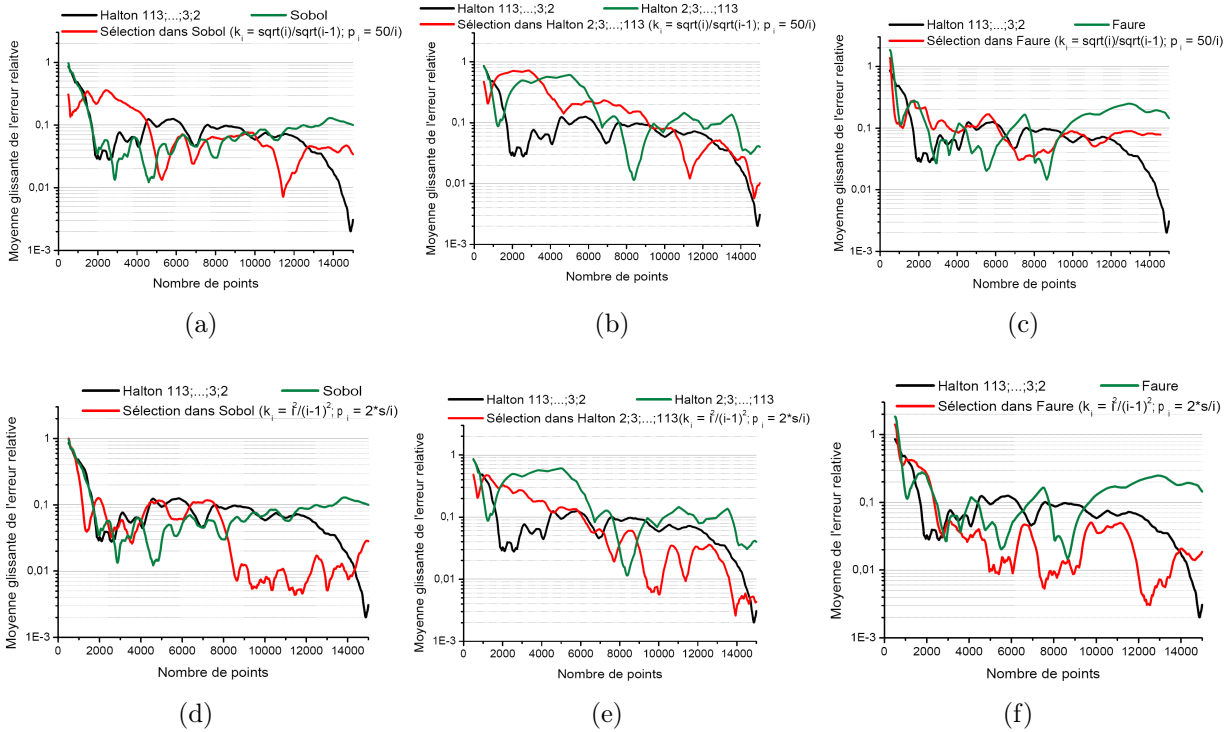


Figure 5.10 – Moyenne glissante de l'erreur relative avec les points sélectionnés par l'algorithme 5.2 où $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$ pour h_6

Nous avons également comparé (figure 5.10) la moyenne glissante de l'erreur relative des points sélectionnés par l'algorithme incrémental 5.2 lorsque les points proposés sont issus d'une suite quasi-aléatoire avec celle des suites quasi-aléatoires dans lesquelles l'algorithme incrémental a sélectionné les points. Avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$, les points sélectionnés dans une suite de Sobol permettent à partir de $n = 5000$, d'obtenir une erreur plus faible que celle de la suite de Sobol (figure 5.10(a)). A partir de $n = 9000$, les points sélectionnés dans une suite de Halton, ayant pour bases les 30 premiers entiers premiers dans l'ordre croissant, permettent d'obtenir une erreur d'intégration plus faible que la suite de Halton dans laquelle les points ont été sélectionnés (figure 5.10(b)). De même, les points sélectionnés dans une suite de Faure permettent d'obtenir à partir de $n = 9000$, une erreur d'intégration plus faible que celle de la suite de Faure (figure 5.10(c)). Cependant, dans

les trois cas, l'erreur d'intégration relative est au mieux équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. Lorsque la décroissance imposée à la discrédance effective est plus sévère, quelle que soit la suite quasi-aléatoire dans laquelle l'algorithme sélectionne les points, il existe un n à partir duquel l'erreur d'intégration relative est nettement inférieure à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée.

Nous avons également comparé l'erreur d'intégration de la sélection de points par notre algorithme avec celle des suites quasi-aléatoires lorsque la valeur de l'intégrale à estimer est plus élevée. Nous avons tracé sur la figure 5.11, la moyenne glissante de l'erreur relative obtenue avec les points sélectionnés par notre algorithme pour les deux jeux de paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (figure 5.11(a)) et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$ (figure 5.11(b)) pour la fonction h_7 définie sur $[-1, 1]^{30}$ par

$$h_7(X) = \mathbb{I}_{\{h_5(X) < 0\}}(X) \quad (5.4)$$

dont l'intégrale, estimée à l'aide de 1 million de points d'une suite de Sobol, vaut approximativement 0,5033, ce qui est loin de constituer un évènement rare.

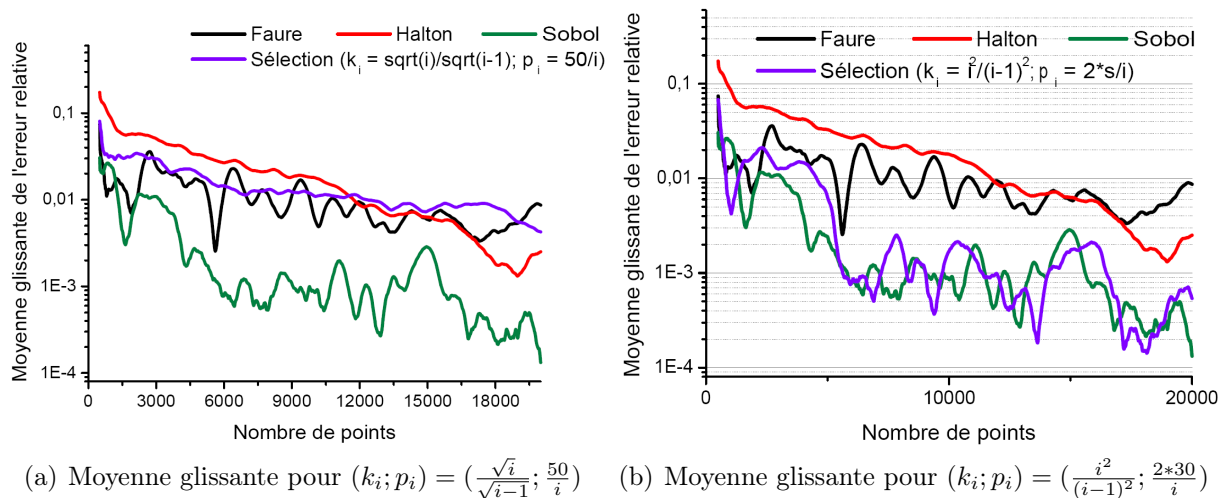


Figure 5.11 – Moyenne glissante de l'erreur relative avec les points sélectionnés par l'algorithme 5.2, avec $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$

Les points proposés sont tirés de manière indépendante selon une loi uniforme sur $[-1, 1]^s$. Tout d'abord nous pouvons constater que dans ce cas, les suites quasi-aléatoires usuelles

permettent d'obtenir une erreur d'intégration plus faible que dans le cas de la fonction h_6 . Comme nous pouvons le constater sur la figure 5.11(a), l'erreur d'intégration relative de la sélection avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (en violet), est nettement supérieure à celle de la suite de Sobol (en vert) et légèrement supérieure à celle de la suite Faure (en noir). Lorsque l'on utilise le deuxième jeu de paramètres pour l'algorithme incrémental, on obtient une erreur relative équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire (figure 5.12(b)).

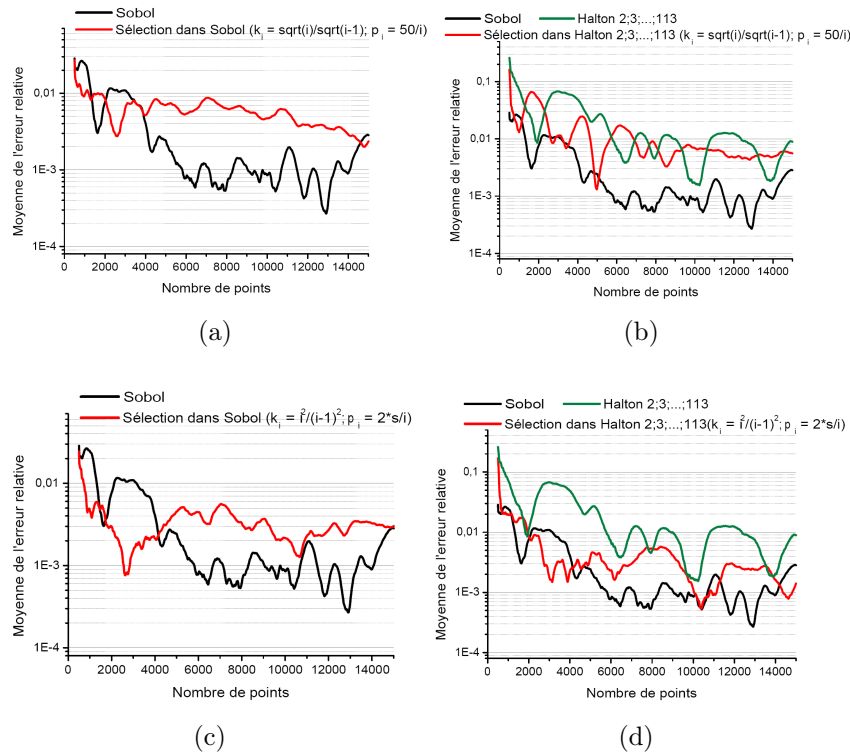


Figure 5.12 – Moyenne glissante de l'erreur relative avec les points sélectionnés dans une suite quasi-aléatoire par l'algorithme 5.2 où $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$ pour h_7

On observe globalement le même phénomène lorsqu'on sélectionne les points dans une suite quasi-aléatoire au lieu d'une suite pseudo-aléatoire. Plus précisément, avec la vitesse de décroissance $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ (figures 5.12(a) et 5.12(b)), l'erreur d'intégration de la sélection est plus élevée que celle de la meilleure suite quasi-aléatoire. Avec la vitesse de décroissance $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ (figures 5.12(c) et 5.12(d)), l'erreur d'intégration est plus faible qu'avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$, mais n'améliore pas sensiblement les résultats obtenus avec la meilleure suite quasi-aléatoire

testée, à savoir la suite de Sobol (en noir). De plus, nous pouvons constater que sélectionner des points dans une suite quasi-aléatoire ayant une erreur d'intégration déjà très faible, peut amener à augmenter l'erreur d'intégration.

Dans ce chapitre, nous n'avons pas présenté de comparaison entre nos résultats et ceux obtenus à l'aide de suites randomisées (section 2.3.4). En effet les méthodes de randomisation que nous avons utilisées ([?] et [?]) sur les suites de Faure, Halton et Sobol n'induisaient pas une erreur d'intégration significativement plus faible que celle obtenue à l'aide des suites de Sobol. Toutefois les méthodes que nous avons testées sont très générales, et pas nécessairement optimales pour les suites considérées. Ce point nécessiterait sans doute une étude plus approfondie.

5.3 Conclusion

Nous avons souhaité utiliser la discrédance effective dans le but de construire une suite adaptée à la fonction d'intérêt dans l'espoir d'obtenir une erreur d'intégration plus faible qu'avec les suites quasi-aléatoires usuelles. Nous allons discuter des améliorations apportées dans les différents cas tests que nous avons envisagés, à savoir tout d'abord une fonction en faible dimension, puis une fonction polynomiale en grande dimension et enfin une fonction indicatrice en grande dimension.

La discrédance possédant de nombreux minima locaux, nous avons opté dans un premier temps pour un algorithme de recuit simulé. Nous rappelons que ce type de méthodes n'est utilisable qu'en petite dimension et que, dans ce cas, les suites quasi-aléatoires sont déjà très performantes. Nous avons pu constater sur des tests numériques, que la minimisation de la discrédance effective permettait d'obtenir en moyenne une erreur d'intégration plus faible que la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. De plus, nous avons pu observer que, même en petite dimension, dans au moins 25% des cas, l'erreur d'intégration était plus faible que celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. Toutefois, l'algorithme de recuit simulé peut être très long à s'exécuter. Il n'est donc adapté que lorsque la dimension et le nombre de points sont faibles. De plus, pour connaître le premier point, il est nécessaire d'attendre la fin de son exécution. C'est pourquoi nous avons mis en place une méthode de

sélection de points utilisable en grande dimension et qui ne suppose pas le nombre de points fixé.

La méthode incrémentale que nous avons développée nécessite de fixer 3 paramètres : les points que l'on propose, la vitesse de décroissance de la discrétance effective et la probabilité d'accepter un point qui ne vérifie pas la condition de décroissance. Au vu des résultats numériques que nous avons obtenus, nous pouvons distinguer trois cas : les fonctions polynomiales, les fonction indicatrices dont la valeur de l'intégrale est élevée et les fonctions indicatrices dont la valeur de l'intégrale se rapproche de celle d'un évènement rare. Tout d'abord, les résultats de tests numériques font apparaitre que, pour la fonction polynomiale que nous avons testée, la suite de points sélectionnée par notre algorithme peut donner une erreur d'intégration en moyenne plus faible que celle des suites quasi-aléatoires usuelles pour les deux vitesses de décroissance envisagées et pour tous les types de points proposés (quasi-aléatoire ou pseudo-aléatoire). L'amélioration apportée par une vitesse de décroissance de la discrétance effective plus rapide que celle que l'on peut attendre de la discrétance infinie d'une suite aléatoire uniforme, n'est visible que si la suite dans laquelle les points sont sélectionnés présente de fortes irrégularités de répartition sur les projections significatives. Nous avons pu constater qu'alors, avec la vitesse de décroissance $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$, il était possible d'obtenir une erreur d'intégration en moyenne équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée avec un nombre de points très inférieur à celui nécessaire dans le cas $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$. Lorsque les points proposés sont issus d'une suite quasi-aléatoire déjà bien échantillonnée sur les projections significatives, l'erreur d'intégration obtenue après sélection des points par l'algorithme incrémental est inférieure à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée et équivalente à la sélection des points par l'algorithme incrémental dans une suite pseudo-aléatoire pour les deux vitesses de décroissance envisagées.

Pour une fonction indicatrice, les performances, que nous avons observées sur nos fonctions tests, des points sélectionnés par l'algorithme incrémental ne sont pas aussi systématiques. Tout d'abord, la probabilité d'accepter un point qui ne vérifie pas la condition de décroissance de la discrétance effective doit être choisie en fonction du nombre de points désiré. Plus précisément, elle doit être élevée lorsque le nombre de points déjà sélectionné est faible et, à l'inverse être faible lorsque le nombre de points sélectionnés s'approche du

nombre de points désiré. Ensuite, nous avons également pu constater que, dans le cas d'une fonction indicatrice, sélectionner les points dans une suite dont l'erreur d'intégration relative était déjà très faible, pouvait donner une erreur d'intégration relative supérieure à celle de la suite initiale. Enfin, la vitesse de décroissance est également un paramètre crucial. Nous avons testé deux vitesses de décroissance : $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$. Parmi ces deux vitesses de décroissance, sur les fonctions indicatrices testées, la vitesse $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ ne permettait pas d'obtenir de meilleurs résultats que les suites quasi-aléatoires usuelles. En revanche, dans certains cas, une vitesse de décroissance plus rapide a permis d'obtenir une erreur d'intégration inférieure à celle des suites quasi-aléatoires usuelles. Plus précisément, lorsque la valeur de l'intégrale à estimer est suffisamment élevée pour que les suites quasi-aléatoires usuelles donnent de bon résultats, avec la vitesse de décroissance $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ nous n'avons pu obtenir au mieux qu'une erreur d'intégration du même ordre de grandeur que celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. Notons que dans le pire des cas, nous avons obtenu une erreur d'intégration, plus élevée certes, mais proche de celle de la meilleure suite quasi-aléatoire testée. A l'inverse, lorsque la valeur de l'intégrale à estimer est trop faible, on s'approche de l'estimation de la probabilité d'occurrence d'un événement rare. Dans ce cas, les suites quasi-aléatoires ne permettent pas d'obtenir une erreur d'intégration faible, et la vitesse de décroissance $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ nous a permis d'obtenir une erreur d'intégration significativement inférieure à celle des suites quasi-aléatoires usuelles. Ainsi l'utilisation de l'algorithme incrémental permet, lorsque les paramètres sont bien choisis, d'obtenir une erreur d'intégration proche de celle obtenue avec la meilleure suite quasi-aléatoire voire meilleure. A présent nous pouvons utiliser l'algorithme incrémental dans le but de prédire un gabarit de SIR.

Troisième partie

Application

CHAPITRE 6

APPLICATION À L'ESTIMATION D'UN GABARIT DE SIGNATURE INFRAROUGE

L'Onera souhaite obtenir des données de base pour pouvoir dimensionner un capteur optronique. Nous nous intéressons en particulier à la SIR de différents avions. Nous rappelons que nous appelons signature, l'ensemble des quantités nécessaires à la prédiction du signal observé par un capteur lorsque un avion est dans son champ de vision. Les caractéristiques exactes des avions étant mal connues, les incertitudes associées doivent être prises en compte pour l'évaluation de la SIR. De plus, les conditions météorologiques peuvent varier, la SIR doit alors être évaluée pour un large ensemble de conditions atmosphériques. La confrontation entre un capteur optronique et un avion est caractérisée par un scénario qui définit, par exemple, le type d'avion et la géométrie d'approche. Cependant, toutes les caractéristiques de l'avion ne sont pas définies par le scénario, de même que les conditions météorologiques. Par conséquent, il n'est pas possible d'évaluer les performances d'un capteur à partir d'un unique jeu de données fixé, les incertitudes sur les caractéristiques de l'avion et de son environnement doivent être prises en compte. L'approche expérimentale étant difficilement réalisable, l'Onera a développé un code informatique, CRIRA, permettant de calculer la signature infrarouge d'un avion dans son environnement. Ce code prend en entrée un grand nombre de variables, environ une soixantaine, décrivant les caractéristiques de l'avion et de son environnement. Les variables d'entrée peuvent être continues, comme l'altitude de vol, ou discrètes comme la présence ou non de nuages. Certaines d'entre elles peuvent être corrélées comme la température de l'air et l'humidité relative. Le code CRIRA renvoie en sortie la SIR correspondante. Plus précisément, nous considérons que le signal brut reçu par le détecteur est une image de son champ de vision. La figure 6.1 présente une image type de la SIR d'un avion de combat standard s'il était détecté à courte distance. Afin de pouvoir détecter l'avion le plus tôt possible, l'ensemble des scénarios envisagés situent l'avion à une grande distance du capteur. Dans ce cas, le signal infrarouge de l'avion

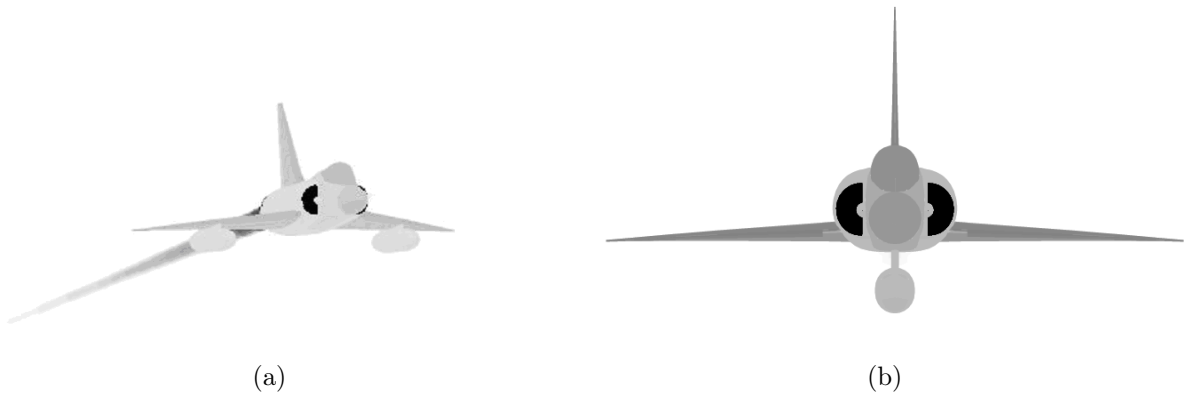


Figure 6.1 – Images de la SIR d'un aéronef de combat standard estimée par CRIRA

se résume à la valeur du flux enregistré sur un seul pixel. Le contraste entre l'avion et le fond peut donc être défini par une seule grandeur scalaire. Plus précisément, pour évaluer la SIR, on est amené à comparer le flux ϕ_{avion} , reçu par le détecteur sur le pixel qui contient l'image de l'avion et le flux ϕ_{voisin} , reçu en un pixel voisin. La différence entre les deux flux s'écrit :

$$\phi_{avion} - \phi_{voisin} = \frac{(L_{avion} - L_{atmosphérique}^{avion}) \cdot \tau_{atmosphère} \cdot S_{avion} \cdot S_{capteur}}{D^2}$$

où

- L_{avion} est la luminance moyenne de l'avion
- $L_{atmosphérique}^{avion}$ est la luminance atmosphérique au niveau de l'avion
- $\tau_{atmosphère}$ est le coefficient d'absorption de l'atmosphère entre l'avion et le capteur
- S_{avion} est la surface apparente de l'avion vu du capteur
- $S_{capteur}$ est la surface apparente de la pupille du capteur vue de l'avion
- D est la distance capteur-avion.

La quantité obtenue en sortie du code CRIRA est l'éclairement différentiel E_{diff} , défini par

$$E_{diff} = \frac{\phi_{avion} - \phi_{voisin}}{S_{capteur}}.$$

Par la suite nous assimilerons signature SIR et éclairage différentiel. Notons que dans tout ce chapitre, pour des raisons de confidentialité, l'échelle des valeurs d'éclairage différentiel est modifiée. En conséquence, les valeurs d'éclairage seuil seront données en unités arbitraires (ua). Cependant, le code ne fournit un résultat que si toutes les données d'entrée sont spécifiées. Or, dans le cas de la confrontation d'un aéronef et d'un capteur optronique cherchant à détecter une menace potentielle, un bon nombre des données d'entrée du code ne sont pas connues avec précision. Soit on ne connaît que leur intervalle de variation, soit elles ne sont connues qu'au travers de leur densité de probabilité, comme les variables météorologiques par exemple. Le résultat obtenu n'est donc pas un nombre unique, une signature infrarouge calculée, mais une plage de valeurs possibles de l'éclairage différentiel à l'intérieur de laquelle se trouve la mesure de SIR réalisée à un instant donné. Il est donc nécessaire de quantifier la dispersion de la SIR due à celle des données d'entrée du code CRIRA. Estimer le gabarit de SIR revient à caractériser la loi de la sortie du code en fonction de celles des entrées. La caractérisation de la loi de la sortie du code passe par le calcul de sa fonction de répartition, c'est-à-dire l'estimation d'une infinité d'intégrales de fonctions de forme analytique inconnue, définies sur un espace de grande dimension. Typiquement, la dimension est de l'ordre de 60. Nous nous intéressons plus particulièrement à la probabilité que l'éclairage différentiel dépasse un certain seuil, pour plusieurs valeurs de seuil. L'estimation de ces probabilités revient à estimer un nombre fini d'intégrales. Chacune d'entre elles intègre une fonction h de forme analytique inconnue et définie sur un espace de grande dimension.

Le temps nécessaire pour effectuer un calcul avec le code CRIRA est non négligeable : de 3 à 5 minutes sur un processeur. Ceci limite le nombre de calculs pouvant être menés en un temps raisonnable sur une dizaine de processeurs à 20000 environ. Dans ces conditions, nous ne pouvons pas espérer évaluer très finement la densité de probabilité de l'éclairage différentiel. En revanche, nous pouvons obtenir une bonne approximation de la probabilité de détection, à savoir la valeur de la fonction de répartition de l'éclairage différentiel en un seuil fixé. Le choix du seuil dépend principalement des caractéristiques du capteur infrarouge. Or nous souhaitons éviter de cibler l'étude sur un capteur particulier afin de pouvoir rester dans un cadre général. C'est pourquoi nous ferons varier le seuil de détection. Notons que, dans le cadre d'un test à seuil, fixer le seuil de détection revient à fixer la

probabilité de fausse alarme, à savoir le premier type d'erreur. Le second type d'erreur correspond aux situations pour lesquelles l'avion ne sera pas détecté, alors qu'il est présent. Il s'agit donc des situations où la SIR de l'avion est inférieur au seuil. Comme nous n'avons pas une valeur de SIR fixée, mais des SIR caractérisées par une densité de probabilité, le calcul de la seconde erreur revient à évaluer la fraction des cas où la SIR est inférieure au seuil. Nous rappelons que l'utilisation de la méthode Monte Carlo (MC), pour estimer la probabilité de détection, n'est pas envisageable dans le cas de CRIRA en raison du nombre de simulations nécessaire à une précision satisfaisante. Quand la dimension du problème est petite, inférieure à 10, la précision peut être améliorée par la méthode de quasi-Monte Carlo (QMC). Cependant, lorsque la dimension est supérieure à approximativement 10, en théorie, la qualité de l'estimateur QMC se dégrade par rapport à celle de l'estimateur MC.

L'objectif de notre travail a été de trouver une méthode adaptée à notre programme informatique CRIRA pour réduire la dimension de l'espace des variables, ou plus exactement, d'estimer la dimension effective de la SIR et d'identifier les variables significatives, avant d'appliquer la méthode quasi-Monte Carlo puis d'utiliser l'information obtenue lors de la réduction de dimension pour améliorer la qualité de l'estimateur QMC.

La définition d'un scénario de confrontation permet de fixer une partie des variables, et ainsi de réduire en partie la dimension. Cependant, même après définition d'un scénario, le nombre de variables restantes est encore élevé, environ 30. Pour réduire encore la dimension, nous avons détaillé différentes approches, l'approche par plan d'expériences (section 1.1) et l'approche par analyse de variance (ANOVA) fonctionnelle (section 1.2). Cependant, nous avons vu que la validité de ces approches nécessite des hypothèses qui sont irréalistes quand on s'intéresse à la prédiction d'un gabarit de SIR. Plus précisément, la méthode par plan d'expériences nécessite de supposer la SIR gaussienne. Or, une étude [Lef06] a mis en évidence que la SIR ne pouvait pas être considérée comme gaussienne. L'ANOVA fonctionnelle suppose l'indépendance globale des variables d'entrée qui n'est pas vérifiée, entre autre, pour la température et l'humidité relative. C'est pourquoi nous avons proposé une nouvelle méthode dont les hypothèses de validité sont moins contraignantes et permettant d'identifier la significativité des variables à partir d'indices représentant la proportion de variance de h expliquée par chacune des variables (chapitre 3).

Après avoir réduit la dimension, il est possible d'appliquer la méthode QMC en fixant les variables non influentes à une valeur quelconque. Cependant, nous avons mis en évidence que la méthode QMC présente une autre lacune (section 2.3.4). En effet, les suites de points utilisées, quoique bien réparties dans l'espace, présentent des irrégularités de répartition sur les projections. Il est alors facile d'imaginer que, si la fonction dépend beaucoup d'une variable sur laquelle la projection des points de la suite est mal répartie, alors la précision des résultats sera moins bonne. Il était donc nécessaire de disposer d'un critère permettant de juger de l'adéquation d'une suite à la fonction d'intérêt h . A l'heure actuelle, les critères existant ne sont pas calculables en pratique et leur approximation nécessite un grand nombre d'évaluations de la fonction. C'est pourquoi nous avons introduit un nouveau critère (chapitre 4) en utilisant les indices précédemment définis. Ainsi nous pouvons évaluer l'adéquation d'une suite, en terme de qualité de répartition des points sur les projections importantes, à la fonction d'intérêt h . De plus, des résultats numériques sur plusieurs fonctions test, ont montré une corrélation entre la valeur du critère pour une suite et la qualité de l'estimateur QMC correspondant. Cependant, ce critère ne permet que de sélectionner une suite parmi un ensemble de suites candidates. La suite sélectionnée n'est alors pas nécessairement optimale par rapport au critère. C'est pourquoi nous avons souhaité construire une suite minimisant au mieux notre critère (chapitre 5). Pour cela, nous avons tout d'abord utilisé un algorithme d'optimisation classique, le recuit simulé (section 5.1.1). Toutefois, dès que la dimension est supérieure à 10 et que le nombre de points est supérieur à 5000, le temps d'exécution du recuit simulé devient un obstacle à sa mise en œuvre. Nous avons donc mis en place un nouvel algorithme, appelé algorithme incrémental, s'inspirant du recuit simulé, dont le temps d'exécution est nettement plus faible (section 5.1.2). Les résultats des tests numériques ont mis en évidence que, pour une fonction de type indicatrice, l'algorithme incrémental permettait, lorsque les suites quasi-aléatoires ne parviennent pas à estimer précisément l'intégrale, d'obtenir une erreur d'intégration nettement inférieure à celle obtenue à partir de suites quasi-aléatoires.

Dans la première section de ce chapitre, nous appliquons notre méthode de réduction de dimension au code de calcul CRIRA. La deuxième section est consacrée à une étude préliminaire, permettant de mettre en évidence l'importance de la minimisation de l'erreur

d'intégration pour le calcul du gabarit de signature infrarouge. Nous détaillons dans la troisième section notre méthode d'échantillonnage pour l'estimation de la fonction de répartition de la signature infrarouge. Enfin, nous interprétons les résultats de l'intégration numérique obtenus dans la dernière section de ce chapitre.

6.1 Estimation des indices de Sobol

Nous avons proposé dans la section 3.1 une nouvelle méthode dont les hypothèses de validité sont mieux adaptées à notre code informatique CRIRA que celles des méthodes usuelles, et qui permet d'identifier la significativité des variables à partir d'indices, représentant la proportion de variance de h expliquée par chacune des variables, que nous avons appelés indices de Sobol fractionnaires. Dans cette section, nous calculons les indices de Sobol fractionnaires, définis dans la section 3.1, des 28 variables d'entrée du code CRIRA non fixées par le scénario. Dans le tableau 6.I, nous donnons les noms et fonctions de chacune de ces 28 variables. Nous avons également classé ces variables par catégorie : les caractéristiques de l'avion (A), les conditions de vol (V) et les conditions atmosphériques ou météorologiques (M).

Les indices de Sobol fractionnaires sont calculés à partir d'un plan factoriel fractionnaire 2^{28-17} de résolution VI . Nous rappelons que l'indice de Sobol fractionnaire du sous-ensemble de variables u_i , est donné par

$$IS_{u_i}^{frac} = \frac{\text{Var}(\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i}))}{\text{Var}(Y)} \quad (6.1)$$

où $\alpha_{u_i}((X^j)_{j \in u_i})$ est issue de la décomposition (3.1). Comme l'éclairement différentiel est une différence de flux, il peut être négatif. Or, dans un objectif de détection, la valeur d'intérêt est le contraste, c'est-à-dire la valeur absolue de l'éclairement différentiel. De plus, la différence d'amplitude entre la plus élevée et la plus faible valeur de contraste étant très importante, nous avons choisis de diminuer cette amplitude en prenant le logarithme népérien de la valeur absolue de l'éclairement différentiel. Ainsi, la réponse à laquelle nous nous sommes

nom	fonction	type	valeurs
H2	Altitude de vol (pied)	V	800 et 1200
CAP	Cap de la trajectoire (°)	V	0 et 90
MACH	Mach de vol	V	0,75 et 0,95
ASSIETTE	Angle entre l'axe longitudinal de l'avion et l'horizontale locale (°)	V	0 et 10
GITE	Angle entre le plan des ailes et un plan horizontal local (°)	V	0 et 10
E_FUSELAGE	Emissivité des peintures du fuselage	A	0,8 et 0,88
E_E_AIR	Emissivité des peintures des entrées d'air	A	0,9 et 0,95
GISEMENT	Position capteur par rapport à l'axe longitudinal avion (°)	V	0 et 10
EPAISS	Épaisseur des nuages	M	200 et 2000 (m)
MODEL	Modèle d'atmosphère (issu de MODTRAN)	M	2 et 3
IHAZE	Numéro de modèle d'aérosol (issu de MODTRAN)	M	4 et 5
HBASE	Hauteur de la base des nuages	M	500 et 2500 (m)
RH	Humidité relative au niveau du sol (%)	M	40 et 90
TA	Température de l'air au niveau du sol ($\pm t$ ° moyenne de la saison) (° C)	M	-7,5 et 7,5
VIS	Visibilité au niveau du sol (km)	M	5 et 23
NUAGES	Présence de nuages	M	0 et 1
IDAY	Numéro du jour ($\pm n$ ° du jour moyen de la saison)	M	-50 et 50
E_F_TUY	Emissivité des peintures du fond de tuyère	A	0,8 et 0,88
E_F_TUY_INT	Emissivité des peintures du fond de tuyère interne	A	0,8 et 0,88
E_VER	Emissivité des peintures de verrière	A	0,8 et 0,88
E_TUY_EXT	Emissivité des peintures du fond des tuyères externes	A	0,3 et 0,4
E_B_FUIT	Emissivité des peintures du bord de fuite	A	0,8 et 0,88
E_NEZ_INTR	Emissivité des peintures du nez intrados	A	0,8 et 0,88
E_B_ATTACHE	Emissivité des peintures du bord d'attaque	A	0,8 et 0,88
REGIME	Position de la manette des gaz	V	0,85 et 0,927
HEURE	Heure du jour (h)	M	12 et 15
DELTAT	Écart de température du sol par rapport à la température moyenne de la saison (K)	M	0 et 10
SALB	Albédo du sol	M	0,4 et 0,1

Tableau 6.I – description et valeurs des variables en entrée du code CRIRA, non fixées par le scénario

intéressés pour le calcul des indices de Sobol fractionnaires est le logarithme népérien de la valeur absolue de l'éclairement différentiel. Nous calculons les indices de Sobol fractionnaires de chacune des variables du tableau 6.I et de chacune des paires de variables dans le cadre de deux scénarios distincts. Les deux scénarios définissent une attaque de type air-sol en France, au dessus de la terre, de jour, et à basse altitude (800 – 1200 pieds). L'avion est situé à une distance fixe de 20 km de l'observateur, ce dernier étant à 2 m du sol et sur l'axe de la trajectoire. L'observateur se trouve toujours dans un faible secteur angulaire face à l'avion.

Les niveaux hauts et bas de chacune des 28 variables sont donnés dans la colonne 'valeurs' du tableau 6.I. Ces valeurs correspondent aux valeurs minimales et maximales que peuvent prendre chacune des variables.

La différence entre les deux scénarios réside uniquement dans le choix du type d'aéronef. Dans le cas du premier scénario, nous avons classé les variables en fonction, dans un premier temps, de leur indice de Sobol fractionnaire respectif (tableau 6.II classement 1), puis dans un deuxième temps, en fonction de la somme des indices de Sobol fractionnaire d'ordre 1 et 2 les incluant (tableau 6.II classement 2). Les variables en rouge dans le tableau 6.II, sont celles dont la position dans le classement remonte lorsqu'on prend en compte les interactions d'ordre 2 et les variables en bleu sont celles dont la position dans le classement descend lorsqu'on prend en compte les interactions d'ordre 2. Nous pouvons noter que les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 représentent 77,73% de la variance totale. En ajoutant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 2, le pourcentage de variance totale expliquée s'élève à 95,95%. Certaines variables comme le modèle d'atmosphère, le cap, ou le gîte, prennent de l'importance lorsqu'on prend en compte les interactions d'ordre 2. A l'inverse, l'albédo du sol et l'émissivité des peintures du nez intrados de l'aéronef semblent peu interagir avec les autres variables. En sommant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 des 10 premières variables du classement 2, nous obtenons un pourcentage de variance expliquée par ces variables de 95,6%. En sommant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 des 10 premières variables du classement 1, nous obtenons un pourcentage de variance expliquée par ces variables de 95,5%. Ceci met en évidence que les 10 premières variables issues du classement 2 expliquent autant de variance que les 10 premières variables issues du classement 1. Par conséquent, les variables ayant un indice de Sobol fractionnaire d'ordre 1

	classement 1	IS^{frac}		classement 2	somme des IS^{frac}	
1	VIS	$4,25.10^{-1}$	42,5%	VIS	$4,92.10^{-1}$	49,2%
2	IHAZE	$2,53.10^{-1}$	25,3%	IHAZE	$3,30.10^{-1}$	33%
3	RH	$7,42.10^{-2}$	7,42%	RH	$1,06.10^{-1}$	10,6%
4	MACH	$1,05.10^{-2}$	1,05%	MACH	$1,09.10^{-2}$	1,09%
5	ASSIETTE	$8,03.10^{-3}$	0,8%	ASSIETTE	$8,46.10^{-3}$	0,85%
6	NUAGES	$3,47.10^{-3}$	0,35%	NUAGES	$4,40.10^{-3}$	0,44%
7	GISEMENT	$8,89.10^{-4}$	0,09%	CAP	$1,51.10^{-3}$	0,15%
8	TA	$6,45.10^{-4}$	0,06%	MODEL	$1,10.10^{-3}$	0,11%
9	REGIME	$5,45.10^{-4}$	0,05%	GISEMENT	$1,10.10^{-3}$	0,11%
10	CAP	$5,10.10^{-4}$	0,05%	TA	$1,09.10^{-3}$	0,11%
11	E_E_AIR	$3,22.10^{-4}$	< 0,05%	REGIME	$7,81.10^{-4}$	0,08%
12	HEURE	$7,77.10^{-5}$	< 0,05%	HEURE	$7,46.10^{-4}$	0,07%
13	IDAY	$7,61.10^{-5}$	< 0,05%	E_E_AIR	$4,54.10^{-4}$	< 0,05%
14	E_NEZ_INTR	$2,53.10^{-5}$	< 0,05%	IDAY	$3,14.10^{-4}$	< 0,05%
15	SALB	$1,70.10^{-5}$	< 0,05%	GITE	$2,04.10^{-4}$	< 0,05%
16	HBASE	$1,41.10^{-5}$	< 0,05%	SALB	$1,84.10^{-4}$	< 0,05%
17	H2	$1,34.10^{-5}$	< 0,05%	EPAISS	$1,69.10^{-4}$	< 0,05%
18	E_TUY_EXT	$1,17.10^{-5}$	< 0,05%	H2	$1,54.10^{-4}$	< 0,05%
19	EPAISS	$4,41.10^{-6}$	< 0,05%	E_TUY_EXT	$1,01.10^{-4}$	< 0,05%
20	E_TUY_INT	$3,94.10^{-6}$	< 0,05%	HBASE	$9,56.10^{-5}$	< 0,05%
21	GITE	$3,84.10^{-6}$	< 0,05%	E_VER	$9,22.10^{-5}$	< 0,05%
22	E_F_TUY	$1,09.10^{-6}$	< 0,05%	E_NEZ_INTR	$8,85.10^{-5}$	< 0,05%
23	E_FUSE	$3,27.10^{-7}$	< 0,05%	E_TUY_INT	$8,76.10^{-5}$	< 0,05%
24	E_B_FUIT	$1,85.10^{-7}$	< 0,05%	E_F_TUY	$8,53.10^{-5}$	< 0,05%
25	E_B_ATTACHE	$1,37.10^{-7}$	< 0,05%	E_B_ATTACHE	$7,67.10^{-5}$	< 0,05%
26	DELTAT	$1,24.10^{-7}$	< 0,05%	DELTAT	$6,98.10^{-5}$	< 0,05%
27	MODEL	$2,38.10^{-8}$	< 0,05%	E_FUSE	$5,98.10^{-5}$	< 0,05%
28	E_VER	$1,25.10^{-9}$	< 0,05%	E_B_FUIT	$5,15.10^{-5}$	< 0,05%

Tableau 6.II – Classements des variables en fonction des indices de Sobol fractionnaires pour le scénario 1

élevé sont aussi celles dont les indices de Sobol fractionnaire d'ordre 2 sont importants.

Nous pouvons ainsi constater que le pourcentage de variance expliqué par les interactions d'ordre 2 est élevé ($95,95 - 77,73 = 18,22\%$), ce qui met en évidence l'importance, pour l'estimation du gabarit de SIR et en particulier pour notre critère de sélection d'une suite de points, de prendre en compte les interactions d'ordre 2. Toutefois, la plupart des interactions d'ordre 2 importantes étant constituées de variables ayant déjà un indice de Sobol fractionnaire d'ordre 1 élevé, le classement des variables les plus importantes est identique avec ou sans les interactions d'ordre 2.

En ne considérant influentes que les variables ayant une somme des indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 supérieure à 0,05%, le classement 2 nous permet d'identifier 12 variables significatives dans le cadre du premier scénario : VIS, IHAZE, RH, MACH, ASSIETTE, NUAGES, CAP, MODEL, GISEMENT, TA, REGIME et HEURE. Parmi ces 12 variables, 7 sont liées aux conditions atmosphériques : VIS, IHAZE, RH, NUAGES, MODEL, TA et HEURE, et 5 sont liées aux conditions de vol : MACH, ASSIETTE, CAP, GISEMENT et REGIME. Les variables liées aux caractéristiques de l'avion semblent, dans le cadre de ce scénario, jouer un rôle mineur pour le calcul de la SIR. Afin d'expliquer ce phénomène, qui peut paraître surprenant à première vue, nous nous basons sur des considérations physiques simples et nous nous contentons des résultats de l'analyse de sensibilité sans entrer dans les détails de chacune des expériences. La faible contribution des caractéristiques de l'avion peut s'expliquer par les conditions du scénario. Tout d'abord, le scénario place l'observateur toujours dans un faible secteur angulaire avant de l'avion. Cette angle de vue favorise la contribution des entrées d'air sur la SIR et à l'inverse, rend faible la contribution liée au jet. Or la contribution des entrées d'air dépend fortement de la température du plan d'entrée du compresseur basse pression du moteur. Cette température dépend elle-même de la vitesse de l'avion. De même, nous avons choisi une structure d'avion avec une forte émissivité infrarouge. L'émission infrarouge de la structure apporte alors également une contribution importante à la SIR. Le niveau de l'émission est directement lié à la température de la surface de l'avion qui dépend du Mach de vol. Par conséquent, la géométrie d'approche de l'avion par rapport au capteur explique la prédominance de la variable MACH sur le calcul de SIR. De plus, l'altitude faible de l'avion et le chemin long entre le capteur et l'avion mènent à

un chemin optique traversant les couches basses de l'atmosphère. Par conséquent, la transmission infrarouge avion-capteur et le rayonnement atmosphérique sont tous deux influencés par la quantité et la nature des aérosols présents à basse altitude, d'où la significativité de IHAZE, VIS et RH. Enfin, beaucoup de paramètres définissant l'avion sont considérés comme parfaitement connus dans le scénario, comme ceux liés à la géométrie de sa structure. Ils n'apparaissent donc pas dans l'analyse de sensibilité. Le classement obtenu est donc spécifique au scénario envisagé. Un scénario différent pourrait mener à des conclusions différentes.

A l'aide du même plan factoriel fractionnaire 2^{28-17} de résolution *VI*, nous calculons les indices de Sobol fractionnaires de chacune des variables du tableau 6.I et de chacune des paires de variables dans le cadre du deuxième scénario, c'est à dire avec le deuxième avion de combat.

Comme pour le scénario 1, nous avons classé les variables en fonction, dans un premier temps, de leur indice de Sobol fractionnaire respectif (tableau 6.III classement 1), puis dans un deuxième temps, en fonction de la somme des indices de Sobol fractionnaire d'ordre 1 et 2 les incluant (tableau 6.III classement 2).

Nous pouvons noter que les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 représentent 78,45% de la variance totale. En ajoutant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 2, le pourcentage de variance totale expliquée s'élève à 96,36%. Nous pouvons ainsi constater que certaines variables comme le modèle d'atmosphère, le cap, ou l'heure, prennent de l'importance lorsqu'on prend en compte les interactions d'ordre 2. A l'inverse, la hauteur de base des nuages et l'émissivité des peintures du nez intrados de l'aéronef semblent peu interagir avec les autres variables. En sommant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 des 10 premières variables du classement 2, nous obtenons un pourcentage de variance expliquée par ces variables de 95,99%. En sommant les indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 des 10 premières variables du classement 1, nous obtenons un pourcentage de variance expliquée par ces variables de 95,96%. Comme dans le cas du scénario 1, les 10 premières variables issues du classement 2 expliquent autant de variances que les 10 premières variables issues du classement 1.

Ainsi, comme dans le cas du scénario 1, les interactions d'ordre 2 représentent une part

	classement 1	IS^{frac}		classement 2	somme des IS^{frac}	
1	VIS	$4,18.10^{-1}$	41,8%	VIS	$4,84.10^{-1}$	48,4%
2	IHAZE	$2,55.10^{-1}$	25,5%	IHAZE	$3,30.10^{-1}$	33%
3	RH	$7,72.10^{-2}$	7,72%	RH	$1,09.10^{-1}$	10,9%
4	ASSIETTE	$1,53.10^{-2}$	1,53%	ASSIETTE	$1,56.10^{-2}$	1,56%
5	MACH	$1,11.10^{-2}$	1,11%	MACH	$1,14.10^{-2}$	1,14%
6	NUAGES	$3,66.10^{-3}$	0,37%	NUAGES	$4,71.10^{-3}$	0,47%
7	REGIME	$1,50.10^{-3}$	0,15%	REGIME	$1,77.10^{-3}$	0,18%
8	E_E_AIR	$8,26.10^{-4}$	0,08%	MODEL	$1,39.10^{-3}$	0,14%
9	GISEMENT	$6,71.10^{-4}$	0,07%	CAP	$1,20.10^{-3}$	0,12%
10	MODEL	$3,94.10^{-4}$	< 0,05%	E_E_AIR	$1,09.10^{-3}$	0,11%
11	TA	$2,21.10^{-4}$	< 0,05%	HEURE	$8,56.10^{-4}$	0,09%
12	HEURE	$1,33.10^{-4}$	< 0,05%	GISEMENT	$8,46.10^{-4}$	0,08%
13	H2	$1,32.10^{-4}$	< 0,05%	TA	$5,22.10^{-4}$	0,05%
14	CAP	$9,29.10^{-5}$	< 0,05%	H2	$2,44.10^{-4}$	< 0,05%
15	HBASE	$2,02.10^{-5}$	< 0,05%	GITE	$2,10.10^{-4}$	< 0,05%
16	E_TUY_INT	$1,16.10^{-5}$	< 0,05%	IDAY	$1,35.10^{-4}$	< 0,05%
17	IDAY	$9,07.10^{-6}$	< 0,05%	EPAISS	$1,12.10^{-4}$	< 0,05%
18	SALB	$7,53.10^{-6}$	< 0,05%	SALB	$9,46.10^{-5}$	< 0,05%
19	E_B_FUIT	$3,45.10^{-6}$	< 0,05%	E_VER	$8,82.10^{-5}$	< 0,05%
20	E_NEZ_INTR	$2,29.10^{-6}$	< 0,05%	E_B_FUIT	$8,75.10^{-5}$	< 0,05%
21	E_VER	$1,46.10^{-6}$	< 0,05%	HBASE	$8,41.10^{-5}$	< 0,05%
22	EPAISS	$9,28.10^{-7}$	< 0,05%	E_TUY_INT	$7,18.10^{-5}$	< 0,05%
23	E_B_ATTAQUE	$8,91.10^{-7}$	< 0,05%	E_B_ATTAQUE	$7,14.10^{-5}$	< 0,05%
24	E_FUSE	$5,51.10^{-7}$	< 0,05%	E_NEZ_INTR	$6,18.10^{-5}$	< 0,05%
25	GITE	$3,10.10^{-7}$	< 0,05%	E_TUY_EXT	$6,09.10^{-5}$	< 0,05%
26	E_TUY_EXT	$2,52.10^{-7}$	< 0,05%	E_FUSE	$5,93.10^{-5}$	< 0,05%
27	E_F_TUY	$3,11.10^{-8}$	< 0,05%	DELTAT	$4,56.10^{-5}$	< 0,05%
28	DELTAT	$1,62.10^{-8}$	< 0,05%	E_F_TUY	$4,00.10^{-5}$	< 0,05%

Tableau 6.III – Classements des variables en fonction des indices de Sobol fractionnaires pour le scénario 2

importante de la variance totale ($96,36-78,45 = 17,91\%$) et la plupart des interactions d'ordre 2 importantes sont constituées de variables ayant déjà un indice de Sobol fractionnaire d'ordre 1 élevé.

En ne considérant influentes que les variables ayant une somme des indices de Sobol fractionnaires d'ordre 1 et 2 supérieure à 0,05%, le classement 2 nous permet d'identifier 13 variables significatives dans le cadre du deuxième scénario : VIS, IHAZE, RH, ASSIETTE, MACH, NUAGES, REGIME, MODEL, CAP, E_E_AIR, HEURE, GISEMENT et TA. Parmi ces 13 variables, les 7 variables liées aux conditions atmosphériques, prédominantes dans le cas du premier scénario, sont dans ce cas également prédominantes. De même, les 5 variables liées aux conditions de vol qui prédominaient dans le cas du premier scénario, se trouvent parmi les variables les plus influentes pour le second scénario. Enfin, on trouve une variable liée directement à l'avion : l'émissivité des entrées d'air. Le classement des variables météorologiques est quasi identique pour les deux scénarios, hormis une permutation entre HEURE et TA. En revanche, le classement des variables liées aux conditions de vol est différent dans le cas du deuxième avion. En effet, dans ce cas, en plus d'une permutation entre l'assiette et la vitesse de vol, nous pouvons observer que la variable REGIME influence la SIR de manière plus importante que dans le cas du premier avion. Nous pouvons supposer que deux moteurs différents ne réagiront pas de la même façon, en terme de température, à un régime fixé. Plus précisément, le régime moteur peut faire varier la température des compresseurs basse pression et ainsi celle des entrées d'air. De même, la température de la tuyère externe ainsi que celle du jet dépendent du régime moteur. Par conséquent, il se peut que, dans le cas du deuxième avion, la température de l'une de ces sources de rayonnement soit plus sensible à la variation du régime. Contrairement au premier scénario, dans le cas de cet avion, l'émissivité des peintures des entrées d'air (E_E_AIR) apparaît en dixième position du classement. Comme nous l'avons précisé dans le cas du premier scénario, la vue de face favorise la contribution des entrées d'air sur le calcul de SIR. Un emplacement différent les rendra plus ou moins visibles dans le cas d'une approche de face. Lorsqu'elles seront moins visibles, une variation de l'émissivité n'aura que peu d'influence sur la SIR résultante. A l'inverse, si les entrées d'air sont très visibles, une variation de leur émissivité aura une influence non négligeable sur la SIR. Une autre explication à la position de la variable

E_E_AIR dans le classement aurait pu être une valeur d'émissivité différente. Or dans les deux scénarios envisagés, le niveau haut de l'émissivité des entrées d'air est le même, tout comme le niveau bas. Enfin, il se peut qu'une forme d'entrées d'air différente leur permette de conserver une température plus faible et ainsi de diminuer la contribution de l'émissivité lors du calcul de SIR. Si l'on s'intéresse uniquement aux caractéristiques de l'avion, à savoir les émissivités, nous pouvons constater que dans les deux scénarios envisagés le classement des émissivités est très différent. Nous pouvons supposer que les raisons de cette différence sont identiques à celles qui placent l'émissivité des entrées d'air en dixième position, à savoir la géométrie de la structure de l'avion.

6.2 Comparaison des erreurs logicielles et statistiques

Les phénomènes physiques impliqués dans le calcul de SIR sont souvent approchés par des modèles de l'analyse numérique aux dérivées partielles. Certains de ces modèles sont très complexes et leur implantation dans le code CRIRA risquerait de rendre le programme inutilisable en raison du temps de calcul. Ces modèles complexes sont alors remplacés par des modèles plus simples mais moins précis. Pour d'autres phénomènes physiques, on ne dispose pas de modèles précis. Dans ce cas on utilise des métamodèles qui peuvent être source d'erreur. Enfin, certains phénomènes contribuant au calcul de SIR ne sont pas pris en compte dans CRIRA en raison de l'absence de modèle et de mesures. Tout ceci peut constituer une source d'erreur pour le calcul de SIR effectué par le programme CRIRA par rapport aux mesures de SIR réalisées en condition réelles. Les études expérimentales montrent que l'erreur relative peut varier entre 10% et 20% de la valeur de SIR renvoyée par CRIRA selon les scénarios étudiés.

Dans cette section, nous souhaitons comparer l'erreur due à la méthode statistique sur l'estimation de la fonction de répartition avec l'erreur d'approximation B faite par le logiciel CRIRA par rapport à la SIR réellement mesurée. En fait, nous considérons que la réponse observée f est le logarithme de la SIR. La valeur exacte du logarithme de la SIR *LogSignature* s'écrit alors $LogSignature = f(X) - B$. Dans les faits, nous considérons $B < 0,1$. Nous allons quantifier l'erreur $e_{logicielle}$ sur la fonction de répartition causée par B . On suppose

alors

$$e_{logicielle} = \left| \int_{[0,1]^s} \mathbb{1}_{\{f(X) < seuil\}}(X) dX - \int_{[0,1]^s} \mathbb{1}_{\{f(X) - B < seuil\}}(X) dX \right|$$

Par linéarité de l'opérateur intégral, et en supposant B positif, nous obtenons

$$\begin{aligned} e_{logicielle} &= \left| \int_{[0,1]^s} (\mathbb{1}_{\{f(X) < seuil\}}(X) - \mathbb{1}_{\{f(X) - B < seuil\}}(X)) dX \right| \\ &= \left| \int_{[0,1]^s} \mathbb{1}_{\{seuil \leq f(X) < seuil + B\}}(X) dX \right|. \end{aligned}$$

La fonction f n'étant pas connue de manière précise, ce problème ne peut pas être résolu analytiquement. De plus, nous avons considéré que l'erreur de calcul de SIR par CRIRA était constante or elle peut dépendre de la valeur de l'éclairement différentiel. Cependant, notre but étant d'avoir une approximation grossière de $e_{logicielle}$, nous fixons arbitrairement B et nous utilisons une approximation linéaire avec interactions $\hat{f}(X)$ de $f(X)$ définie sur $[-1, 1]^4$, à savoir

$$\begin{aligned} \hat{f}(X^{VIS}, X^{IHAZE}, X^{RH}, X^{MACH}) &= -14,48 + 1,76.X^{VIS} + 1,36.X^{IHAZE} - 0,73.X^{RH} \\ &\quad + 0,28.X^{MACH} + 0,56.X^{IHAZE} X^{RH} + 0,40.X^{VIS} X^{RH} \\ &\quad - 0,01.X^{IHAZE} X^{MACH} - 0,90.X^{VIS} X^{IHAZE} \\ &\quad + 0,02.X^{VIS} X^{MACH} \end{aligned}$$

où X^{VIS} est le facteur correspondant à la visibilité météorologique, X^{IHAZE} est celui correspondant au modèle d'aérosol, X^{RH} à l'humidité relative et X^{MACH} à la vitesse en nombre de mach. Les coefficients de ce modèle ont été estimés par moindres carrés (équation (1.4)). L'erreur logicielle due à B est approchée par

$$\hat{e}_{logicielle} = \left| \frac{1}{2^4} \int_{[-1,1]^4} \mathbb{1}_{\{seuil \leq \hat{f}(X) < seuil + B\}}(X) dX \right| \quad (6.2)$$

Notons que l'on considère $X = (X^{VIS}, X^{HAZE}, X^{RH}, X^{MACH})$ uniforme sur $[-1; 1]^4$, d'où le coefficient $\frac{1}{2^4}$ dans (6.2). Nous avons fixé le seuil à $-16,10$ pour que la probabilité que l'on estime soit faible, ici cette probabilité est égale à $I = 0,143$. Au regard de la précision du code CRIRA, nous quantifions l'erreur $|I - I_n^{QMC}|$ nécessaire. Pour une erreur B , sur le logarithme de la SIR calculée par CRIRA, que nous fixons arbitrairement à $0,05$ l'erreur (6.2), sur l'estimation de l'intégrale, est de l'ordre de $0,006$. Ainsi, pour un seuil de $-16,10$ il n'est pas nécessaire que l'erreur d'intégration $|I - I_n^{QMC}|$ soit inférieure à $0,006$. En appliquant une démarche similaire pour un seuil de -17 la probabilité que l'on estime est égale à $I = 0,062$ et pour une erreur de calcul de SIR $B = 0,05$ l'erreur (6.2) est de l'ordre de $0,003$. Ainsi, pour un seuil de -17 il n'est pas nécessaire que l'erreur d'intégration $|I - I_n^{QMC}|$, soit inférieure à $0,003$.

Nous pouvons ainsi constater que, au regard de la précision du code CRIRA, nous avons besoin d'une estimation précise de I .

6.3 Résultats numériques de l'estimation du gabarit de SIR

Maintenant que nous avons identifié les variables significatives, nous pouvons procéder à l'estimation du gabarit de SIR. Pour cela, nous définissons la discrédance effective du code CRIRA en pondérant les discrédances des projections par les indices de Sobol fractionnaires que nous avons calculés dans la section 6.1. Afin de minimiser l'erreur d'estimation de la probabilité de détection, nous avons mis en place un algorithme de sélection de points (chapitre 5) visant à minimiser la discrédance effective de la fonction d'intérêt, à savoir $h(X) = \mathbb{1}_{\{f(X) < seuil\}}(X)$, qui s'inspire d'un algorithme d'optimisation, le recuit simulé. Le temps d'exécution de notre algorithme pour fournir 20000 points en dimension 28 avec les deux jeux de paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{56}{i})$ étant raisonnable (72 et 96 heures respectivement sur un processeur) comparativement au temps de calcul des 20000 points par CRIRA (1700 heures sur un processeur), nous avons généré des points sur $[0, 1]^{28}$. Dans chacun des cas, les points proposés pour l'exécution de l'algorithme sont issus d'un

tirage aléatoire uniforme sur $[0, 1]^{28}$. Cependant, les variables d'entrée du code CRIRA ne sont pas toutes définies sur $[0, 1]$. De plus, certaines variables sont qualitatives et ne peuvent prendre qu'un nombre fini de valeurs. Les variables météorologiques, quant à elles, ne sont connues qu'au travers de statistiques recueillies dans des bases de données. Enfin, certaines variables, comme l'humidité relative et la température de l'air peuvent être corrélées. Lorsque nous n'avons aucune information sur la densité de probabilité des variables continues définies sur un ensemble différent de $[0, 1]$, nous avons supposé qu'elles étaient uniformes sur leur intervalle de définition et par suite, nous avons effectué une simple transformation affine pour nous ramener à leur intervalle de définition. Ainsi, hormis les variables HEURE, MODEL, IHAZE, HBASE, RH, TA, VIS, NUAGES et IDAY, les 19 variables du code CRIRA sont échantillonnées selon les points de notre algorithme après avoir effectué une transformation affine. Les variables qualitatives qui ne peuvent prendre qu'un nombre fini de valeurs, et pour lesquelles on ne dispose pas de statistiques en raison du manque de données, ont été échantillonnées de manière à ce que chacun de leur niveau ait la même probabilité d'occurrence. Ainsi, pour la variable HEURE, qui ne peut prendre que les valeurs 12 ; 13 ; 14 et 15, nous nous sommes ramenés à la loi uniforme discrète sur $\{12; 13; 14; 15\}$ à partir des points sélectionnés par notre algorithme. De même, pour la variable MODEL, nous nous sommes ramenés à une loi uniforme discrète sur $\{2; 3\}$ codant pour *été* et *hiver* respectivement. La variable IHAZE ne peut prendre que les valeurs *urbain*, *maritime* et *rural* avec la probabilité 0,45, 0,1 et 0,45 respectivement. A partir des points sur $[0; 1]$, nous échantillonnons la variable IHAZE avec la probabilité discrète correspondante.

Les variables restantes HBASE, RH, TA, VIS, NUAGES et IDAY peuvent être corrélées entre elles et à MODEL ou IHAZE. Prenons l'exemple de la température et de l'humidité relative. Dans le cas où (TA, RH) serait un vecteur gaussien, il suffirait de les décorrélérer. Cependant, parmi les variables corrélées, aucun r -uplet ($r \leq 7$) ne peut être considéré comme vecteur gaussien. En théorie, il est toujours possible de trouver une transformation g telle que $g(U, V) = (TA, RH)$ où U et V sont deux variables aléatoires indépendantes uniformes. Cependant, en pratique, trouver cette transformation peut s'avérer difficile. Nous avons donc envisagé une autre approche pour traiter ces données. Nous disposons, pour chacune des 6 valeurs possibles du couple $(MODEL, IHAZE)$, d'une base de données pour le 6-uplet

(HBASE, RH, TA, VIS, NUAGES, IDAY).

Le traitement envisagé consiste, pour chaque valeur du couple (MODEL, IHAZE), à simuler la loi du vecteur aléatoire (HBASE, RH, TA, VIS, NUAGES, IDAY) par bootstrap à partir de la base de données. Plus précisément, pour chaque valeur du couple (MODEL, IHAZE) nous effectuons un tirage avec remise de la valeur du 6-uplet dans la base de données correspondante. Pour cela, nous avons numéroté chaque réalisation du 6-uplet de la base de données correspondante à la valeur du couple (MODEL, IHAZE). Puis nous avons effectué un tirage avec remise d'une valeur du 6-uplet en simulant un entier, selon une loi uniforme à partir d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires (nous aurions pu également prendre une suite quasi-aléatoire à la place du générateur de nombres pseudo-aléatoires), compris entre 1 et le nombre de réalisations du 6-uplet dont on dispose dans la base de données. Les corrélations entre variables sont ainsi prises en compte de manière intrinsèque. Nous aurions pu également envisager un traitement des variables corrélées à l'aide de copules [ACL09] [Nel99]. Toutefois, en raison du peu d'éléments présents dans la base de données, nous avons préféré la méthode de bootstrap.

Dans la suite de cette section, nous comparons les valeurs de la probabilité de seuil estimée avec 10000 ; 20000 et éventuellement 30000 points de différentes suites pour chacun des scénarios de la section 6.1. Comme nous l'avons remarqué au chapitre précédent, l'erreur d'intégration oscille fortement en fonction du nombre de points. Par conséquent il n'est pas possible d'affirmer que le résultat obtenu avec 30000 points est meilleur que celui obtenu avec 10000 ou 20000 points. Toutefois nous pouvons raisonnablement penser que l'estimation de la fonction de répartition est stabilisée à 30000 points. Par la suite, nous considérons la valeur de la probabilité obtenue avec 30000 points comme valeur de référence. De plus, cette valeur de référence nous a paru justifié car 1000 échantillons de 20000 points et 1000 de 30000 points constitués par tirage aléatoire avec remise parmi ces 30000 points nous ont donné les mêmes estimations de probabilités de détection, à 0,1% près.

Nous avons tracé sur la figure 6.2, l'estimation de la fonction de répartition de la SIR, dans le cadre du premier scénario, obtenue à l'aide de $n = 10000$ puis 20000, puis 30000 points d'une suite de Faure en base 11. Plus précisément, pour chacune des suites, les variables corrélées sont échantillonnées par bootstrap, les 9 variables indépendantes les plus

significatives sont échantillonnées selon une suite de Faure en base 11 et les 11 variables restantes sont échantillonnées par uniquement deux valeurs (données dans le tableau 6.I). Il peut paraître risqué de ne prendre que deux valeurs pour les variables que nous avons qualifiées de non significatives suite à l'analyse de sensibilité. En réalité ce choix a été fait afin de confirmer les résultats de l'analyse de sensibilité. Plus précisément, pour la valeur haute et la valeur basse de la variable non significative nous obtenons deux nuages de points de valeurs de la SIR et contenant chacun $n/2$ points. La vérification heuristique a posteriori de la non significativité de la variable consiste alors à vérifier que les deux nuages de points ne sont pas visuellement significativement différents. Dans le cas contraire, deux nuages de points se distingueraient nettement et révéleraient l'importance de cette variable.

Nous pouvons constater sur cette figure que le comportement de la fonction de répartition de la SIR est similaire dans les 3 cas. Afin de calculer la probabilité de détection de l'avion par un capteur, nous avons besoin d'une valeur de seuil pour cette détection. Dans un premier temps, en attendant une estimation plus précise, nous avons fait l'hypothèse d'un capteur idéal, uniquement limité par le bruit de photons du fond, de diamètre de pupille d'entrée 20 cm, de temps d'intégration 0,04 s, avec un demi champ élémentaire d'un pixel de 0,1 mrd, et nous avons calculé en entrée de pupille l'éclairement équivalent au bruit de photons du fond en bande II. Nous obtenons ainsi un premier seuil de 1,4 ua. Le seuil de détection associé a été posé égal à 10 fois cette valeur. Le deuxième seuil est donc de 14 ua. Compte tenu des fluctuations spatiales du fond, un capteur réaliste aurait un seuil, non pas 10 mais 20 à 100 fois plus élevé. Nous avons donc pris pour troisième seuil la valeur 30 ua. Lorsqu'on s'intéresse à un seuil de SIR de 30 ua, la probabilité que la SIR soit inférieure à ce seuil est estimée à 20,8% lorsqu'on utilise 10000 points de la suite de Faure, 20,3% avec 20000 points et 20,3% avec 30000 points. Lorsqu'on s'intéresse à un seuil de détection de 14 ua, la probabilité que la SIR soit inférieure à ce seuil est estimée à 15,2% lorsqu'on utilise 10000 points de la suite de Faure, 14,7% avec 20000 points et 30000 points. En d'autres termes, si l'on considère que l'on détecte l'avion lorsque l'éclairement différentiel est supérieur à 14 ua, la probabilité de détecter l'avion dans le cadre du premier scénario, est estimée à 85,3%. De même, pour un seuil de détection de 1,4 ua, la probabilité de détecter l'avion dans le cadre du premier scénario est estimée à 89,8% avec 10000 points, 90,1 % avec 20000 points ou avec

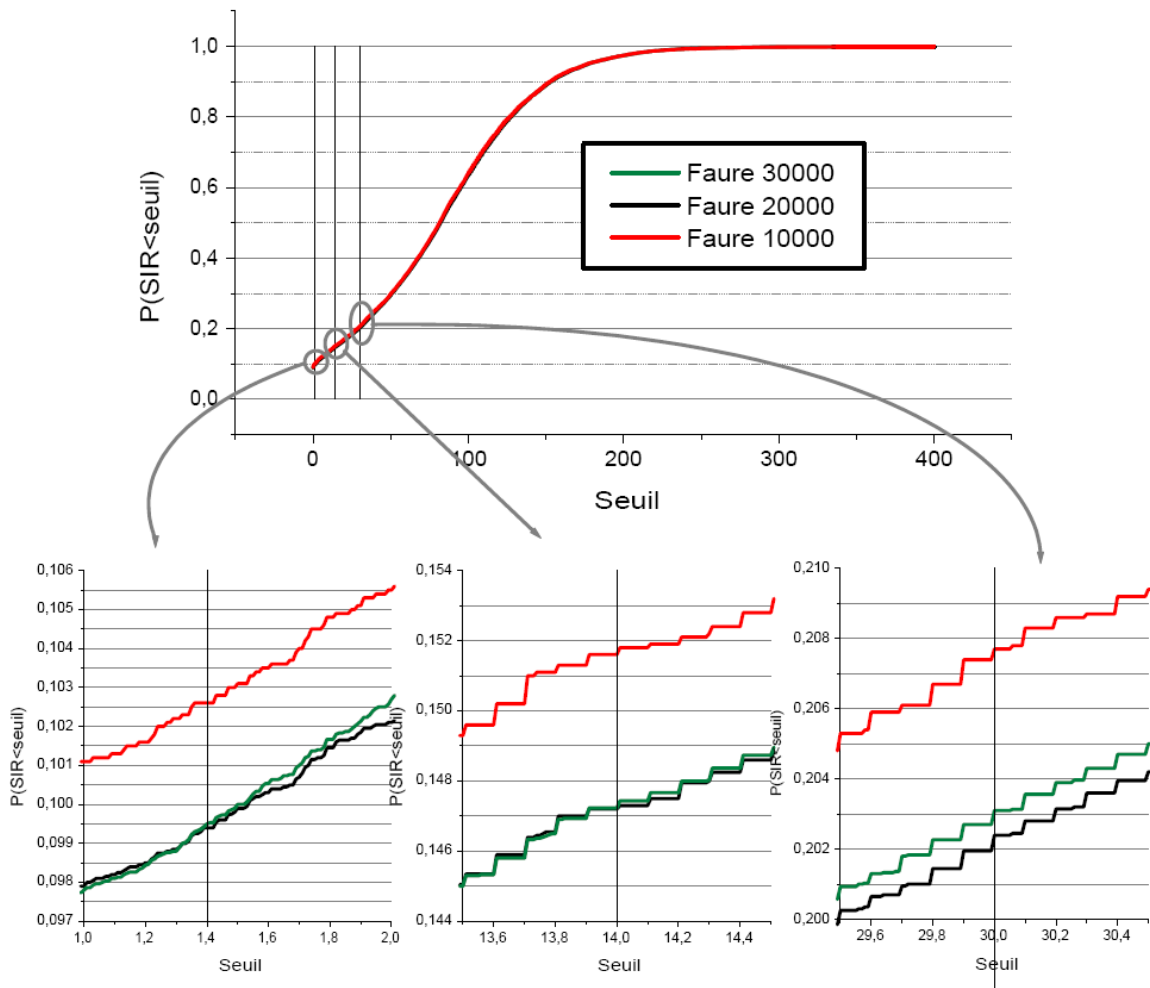


Figure 6.2 – Estimations de la fonction de répartition de la SIR pour le scénario 1

30000 points.

Nous avons par la suite comparé ces résultats à ceux obtenus à l'aide de 10000 puis 20000 points sélectionnés par l'algorithme incrémental 5.2 dans une suite pseudo-aléatoire, avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (figure 6.3). Nous rappelons que les résultats obtenus avec 30000 points d'une suite de Faure sont notre base de comparaison quel que soit le seuil. Nous pouvons constater que la fonction de répartition de la SIR estimée avec la sélection de l'algorithme incrémental se comporte comme celle estimée avec 30000 points d'une suite Faure. Lorsqu'on s'intéresse à un seuil de détection de 1,4 ua , la différence entre l'estimation

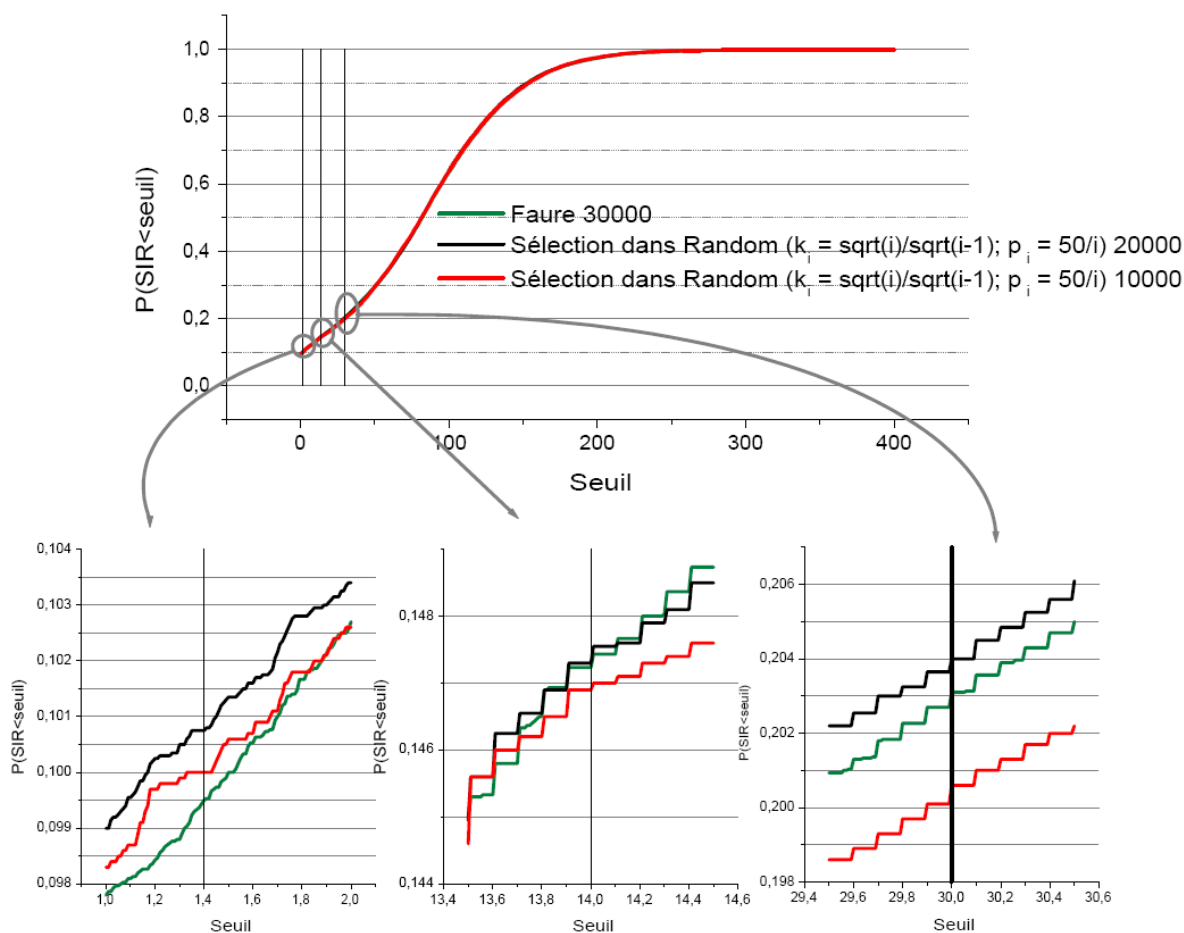


Figure 6.3 – Estimations de la fonction de répartition de la SIR pour le scénario 1

obtenue à l'aide des points sélectionnés par l'algorithme incrémental et celle obtenue avec 30000 points d'une suite Faure est de l'ordre de 0,1%. Avec 20000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 1,4 ua est estimée à 10,1%, contre 10% avec 10000 points. Pour un seuil de 14 ua , la différence par rapport à la suite de Faure est inférieure à 0,1%. Avec 20000 ou 10000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 14 ua est estimée à 14,7%. Pour un seuil de 30 ua , la différence avec la suite de Faure est au plus de 0,3%. Avec 20000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 30 ua est estimée à 20,4%, contre 20,1% avec 10000 points. Ainsi, bien que la décroissance imposée à la discrétion effective lors de la sélection des points soit $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$,

les estimations de la fonctions de répartition, obtenues à l'aide des points sélectionnés dans une suite pseudo-aléatoire, sont très proches de celle obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure. L'écart le plus important est au plus de 0,3% et est observé au seuil de 30 *ua*.

Enfin, toujours dans le cadre du premier scénario, nous avons estimé la fonction de répartition de la SIR à l'aide de points sélectionnés par l'algorithme 5.2 où, cette fois-ci, les paramètres sont $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{28*2}{i})$. Nous avons tracé sur la figure 6.4 les estimations de la fonction de répartition de la SIR en fonction du seuil, obtenues avec 10000 puis 2 000 points sélectionnés dans une suite pseudo aléatoire. Nous comparons l'estimation obtenue à celle issue de 30000 points d'une suite de Faure. Lorsqu'on s'intéresse à un seuil de détection de 1,4 *ua*, la différence avec l'estimation obtenue à l'aide d'une suite de Faure est au plus de 0,4%. Avec 20000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 1,4 *ua* est estimée à 10,2%, contre 10,3% avec 10000 points. Pour un seuil de 14 *ua*, la différence avec la suite de Faure est au plus de 0,1%. Avec 20000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 14 *ua* est estimée à 14,7%, contre 14,6% avec 10000 points. Pour un seuil de 30 *ua*, la différence est de l'ordre de 0,2%. Avec 20000 ou 10000 points de notre sélection, la probabilité que la SIR soit inférieure à 30 *ua* est estimée à 20,5%. Ainsi, avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{28*2}{i})$ lors de la sélection des points, les estimations de la fonctions de répartition, obtenues à l'aide des points sélectionnés dans une suite pseudo-aléatoire, sont très proches de celle obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure. L'écart le plus important est au plus de 0,4% et est observé au seuil de 1,4 *ua*.

Nous avons regroupé sur la figure 6.5 les estimations de la fonction de répartition de la SIR pour les seuils 1,4 ; 14 et 30 *ua*, réalisées avec la suite de Faure et la sélection des points par l'algorithme 5.2. Nous pouvons ainsi constater que les 10000 points sélectionnés par l'algorithme incrémental sont la plupart du temps, plus proches de l'estimation réalisées avec 30000 points d'une suite de Faure que les 10000 premiers points de cette même suite 6.5(a). En revanche, les 20000 points sélectionnés par l'algorithme incrémental sont la plupart du temps plus éloignés de l'estimation obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure que les 20000 premiers points de cette même suite 6.5(b). Cette observation rejoint les résultats obtenus lors du chapitre précédent. Rappelons que nous avons mis en évidence, dans le cas d'une fonction indicatrice, que l'algorithme incrémental permettait d'obtenir de meilleurs

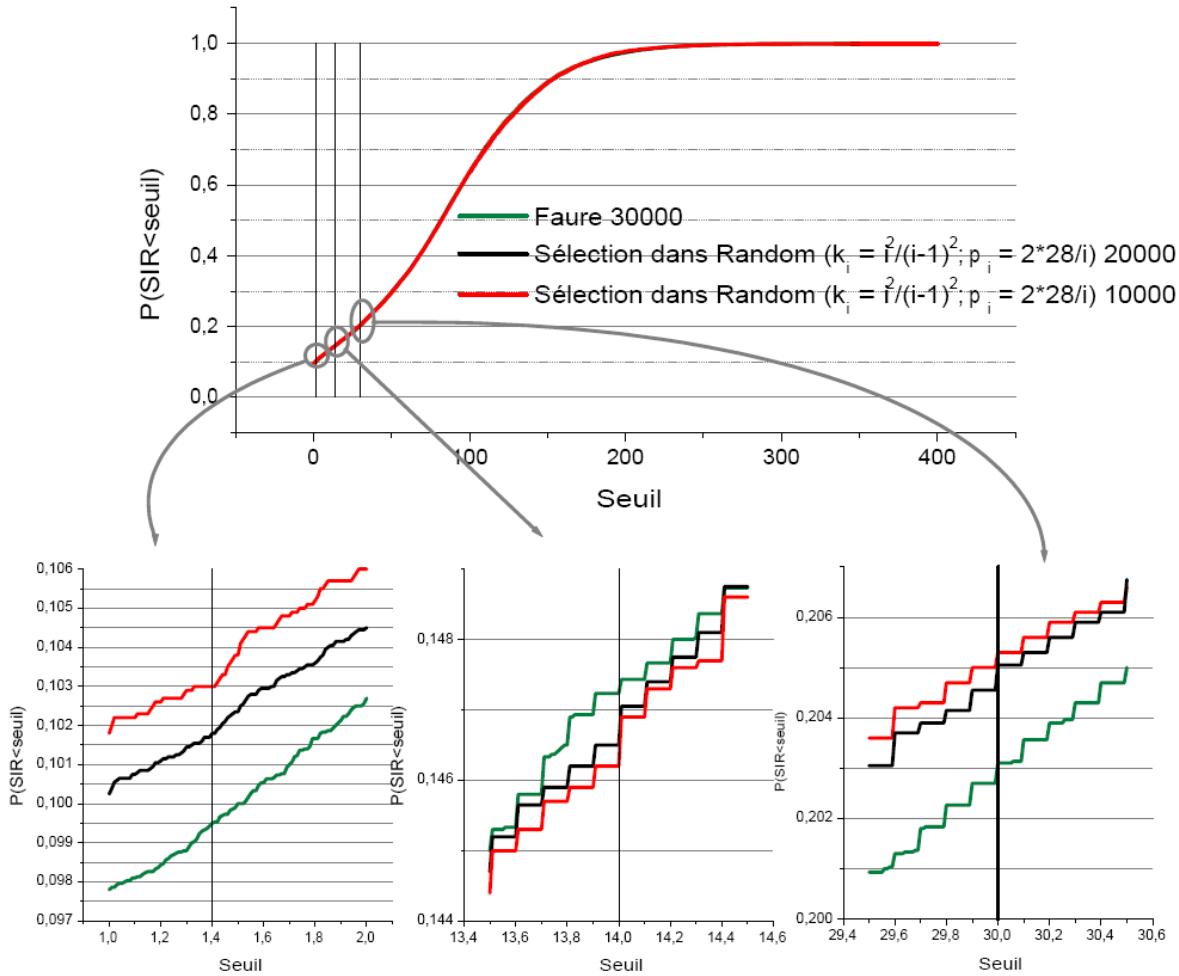
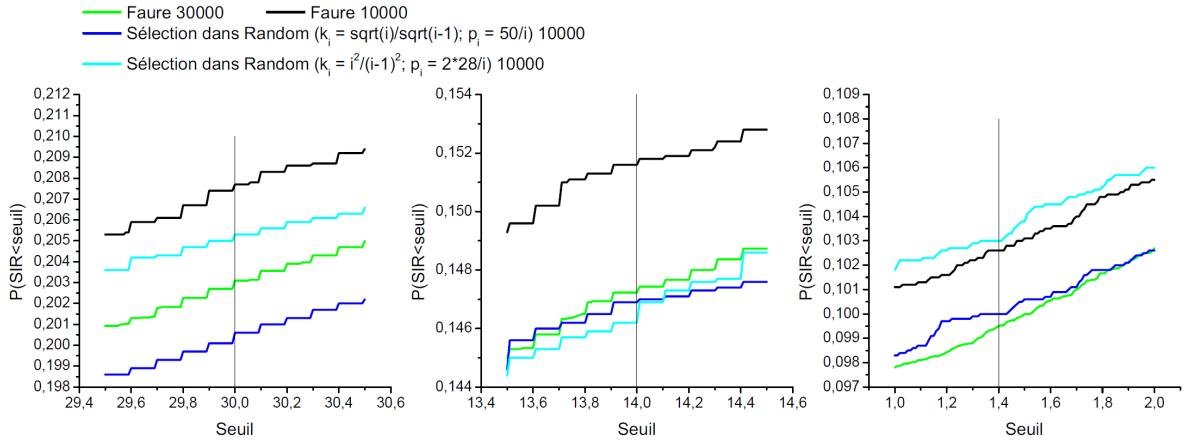


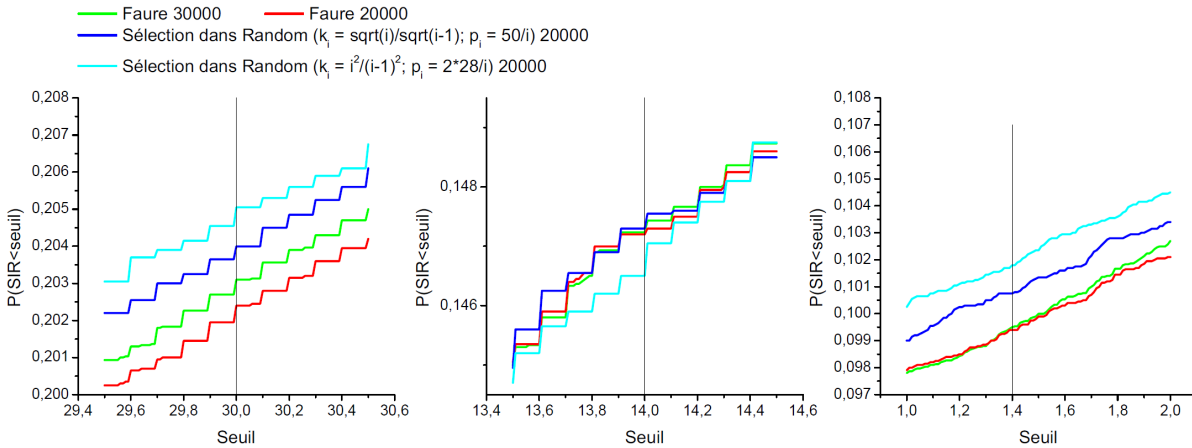
Figure 6.4 – Estimations de la fonction de répartition de la SIR pour le scénario 1

résultats que les suite quasi-aléatoires uniquement lorsque celles-ci échouent à estimer avec précision l’intégrale d’intérêt. Par conséquent, il parait raisonnable de penser que, dans le cas du code CRIRA, les 10000 premiers points de la suite de Faure ne parviennent pas à estimer correctement la fonction de répartition alors que les 20000 premiers points permettent d’obtenir une erreur faible.

Nous avons, par la suite, dans le cadre du deuxième scénario, effectué les mêmes comparaisons que pour le premier scénario. Plus précisément nous avons estimé la fonction de



(a)



(b)

Figure 6.5 – Estimations de la fonction de répartition de la SIR pour le scénario 1

répartition de la SIR dans le cadre du deuxième scénario, avec 10000 , 20000 , 30000 points d’une suite de Faure en base 11, 10000, 20000 points sélectionnés par l’algorithme incrémental dans une suite pseudo-aléatoire avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (S1 Rand), puis dans une suite pseudo-aléatoire avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{28*2}{i})$ (S2 Rand). Nous considérons là encore, l’estimation de la probabilité obtenue avec 30000 points de la suite de Faure comme référence pour toutes les comparaisons avec d’autres suites. La suite de Faure utilisée est en base 11. Plus précisément, comme pour le premier scénario, les variables cor-

$P(SIR < seuil)$							
scénario 2							
	10000 points			20000 points			30000 points
seuil	S1 Rand	S2 Rand	Faure	S1 Rand	S2 Rand	Faure	Faure
1,4	9,7%	9,8%	10,2%	10%	9,9%	9,9%	9,9%
14	13,9%	13,7%	14,4%	14,1%	14,1%	14,1%	14,2%
30	19,1%	19,1%	19,7%	19,3%	19,3%	19,2%	19,2%

Tableau 6.IV – Récapitulatif des estimations de la probabilité de ne pas dépasser le seuil pour le scénario 2

rélees sont traitées par bootstrap, les 9 variables indépendantes les plus significatives sont échantillonnées par une suite de Faure en base 11 et les 11 variables restantes sont échantillonnées par 2 valeurs. Afin d'alléger la présentation des résultats numériques, nous nous contentons ici de récapituler les résultats pour le deuxième scénario dans le tableau 6.IV.

Lorsqu'on s'intéresse à un seuil de détection de $1,4 ua$, la différence, par rapport aux 30000 points de la suite de Faure, entre les estimations obtenues à l'aide de la suite 'S1 Rand' est au plus de $0,2\%$, pour un seuil de $14 ua$, la différence est de l'ordre de $0,2\%$ et pour un seuil de $30 ua$, la différence est de l'ordre de $0,1\%$. Ainsi, bien que la décroissance imposée à la discrédance effective lors de la sélection des points soit $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$, les estimations de la fonctions de répartition, obtenues à l'aide des points sélectionnés dans une suite pseudo-aléatoire, sont très proches de celle obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure. La différence la plus importante étant observée au seuil de $14 ua$ avec la valeur de $0,2\%$.

Pour un seuil de détection de $1,4 ua$, la différence entre les 30000 points de la suite de Faure et la suite 'S2 Rand' est inférieure à $0,1\%$, pour un seuil de $14 ua$, la différence est au plus de $0,5\%$ et enfin, pour un seuil de $30 ua$, la différence avec la suite de Faure est au plus de $0,2\%$. Ainsi, avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{28*2}{i})$ lors de la sélection des points, les estimations de la fonctions de répartition, obtenues à l'aide des points sélectionnés dans une suite pseudo-aléatoire, sont très proches de celle obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure. La différence la plus importante étant observée au seuil de $14 ua$ avec la valeur de $0,5\%$.

Nous pouvons ainsi constater que les 10000 points sélectionnés par l'algorithme incrémen-

$P(SIR < seuil)$							
scénario 1							
	10000 points			20000 points			30000 points
seuil	S1 Rand	S2 Rand	Faure	S1 Rand	S2 Rand	Faure	Faure
1, 4	10%	10,3%	10,3%	10,1%	10,1%	9,94%	9,95%
14	14,7%	14,6%	15,2%	14,7%	14,6%	14,7%	14,7%
30	20,1%	20,5%	20,8%	20,4%	20,5%	20,2%	20,3%
scénario 2							
	10000 points			20000 points			30000 points
seuil	S1 Rand	S2 Rand	Faure	S1 Rand	S2 Rand	Faure	Faure
1, 4	9,7%	9,8%	10,2%	10%	9,9%	9,9%	9,9%
14	13,9%	13,7%	14,4%	14,1%	14,1%	14,1%	14,2%
30	19,1%	19,1%	19,7%	19,3%	19,3%	19,2%	19,2%

Tableau 6.V – Récapitulatif des estimations de la probabilité de ne pas dépasser le seuil pour les deux scénarios

tal sont la plupart du temps, plus proches de l'estimation réalisée avec 30000 points d'une suite de Faure que les 10000 premiers points de cette même suite. En revanche, les 20000 points sélectionnés par l'algorithme incrémental sont la plupart du temps plus éloignés de l'estimation obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure que les 20000 premiers points de cette même suite. Comme dans le cas du premier scénario, il semble raisonnable de penser que les 10000 premiers points de la suite de Faure ne parviennent pas à estimer correctement la fonction de répartition alors que les 20000 premiers points permettent d'obtenir une erreur faible.

Le tableau 6.V résume les estimations des valeurs de la fonction de répartition aux seuils $30 ua$, $14 ua$ et $1, 4 ua$ obtenues à l'aide de la suite de Faure, de la sélection incrémentale dans une suite pseudo-aléatoire avec les paramètres $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ (S1 Rand) et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{28*2}{i})$ (S2 Rand). En admettant les 30000 points de la suite de Faure comme référence, l'écart par rapport à l'estimation correspondante est, pour les 2 jeux de paramètres et pour les deux scénarios envisagés, inférieur à 0,5%.

Nous souhaitons maintenant souligner l'importance du scénario dans l'estimation de la probabilité de seuil. Tout d'abord, ce tableau met en évidence que la probabilité que la SIR soit inférieure à $30 ua$ est différente dans le cas du scénario 1 (20,3%) et du scénario 2

(19,2%). Cette tendance se confirme lorsque le seuil augmente, la différence pouvant s'élever jusqu'à 10% pour un seuil de 150 *ua*, comme l'illustre la figure 6.6. Rappelons que les deux scénarios ne diffèrent que par la catégorie d'avion choisie. La différence de probabilité entre les deux scénarios peut nous laisser penser que le deuxième avion envisagé possède, à capteur identique, une plus forte probabilité d'être détecté que le premier. De plus, nous pouvons constater que, bien que le seuil 1,4 *ua* soit faible, la probabilité que la SIR soit inférieure à 1,4 *ua* est élevée (presque 10%) pour les 2 scénarios. Ceci n'est pas très surprenant au regard des conditions environnementales des scénarios. En effet, les valeurs de la visibilité envisagées pour les 2 scénarios peuvent être très faibles. Par conséquent, on peut s'attendre à ce que la valeur de SIR correspondant aux valeurs faibles de la visibilité soit également faible. Cependant, une visibilité aussi faible est très peu probable en situation de combat. Nous pouvons donc facilement imaginer que des conditions météorologiques moins extrêmes pourraient conduire à des estimations de probabilités moins élevées pour de faibles seuils et permettre aux différences entre les deux avions d'apparaître plus clairement.

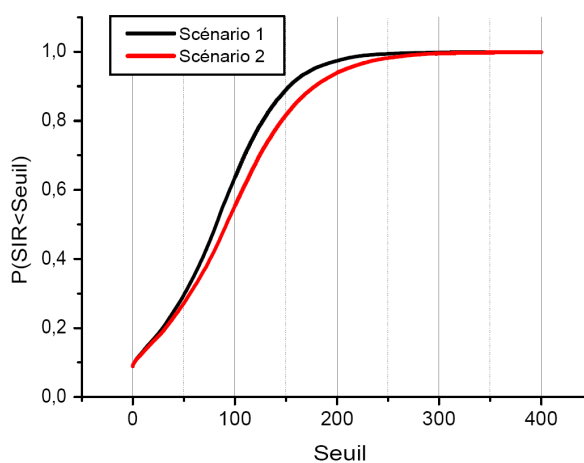


Figure 6.6 – Comparaison des estimations de la fonction de répartition de la SIR pour les deux scénarios

Lors de l'application des méthodes développées au cours de la thèse dans le cadre de l'estimation de la fonction de répartition de la signature infrarouge d'un aéronef et de probabilités de détection présentée dans ce chapitre, nous n'avons pas pu envisager la mise en œuvre de techniques du type randomized-QMC ([LL02], [L'E09]) pour comparer la préci-

sion des résultats obtenus avec les différents ensembles de points. Celles-ci sont en effet trop coûteuses : il nous était impossible de réaliser plus de 50000 simulations au total, au vu des temps de calculs.

L'objectif de la thèse était de proposer des méthodes applicables dans ce cas concret, en tenant compte des contraintes spécifiques associées (non indépendance des variables, loi jointe inconnue, non gaussiannité). Ainsi, l'algorithme incrémental inspiré du recuit simulé que nous proposons présente l'avantage de s'adapter facilement à la construction de points dont une partie des coordonnées n'est pas définie par transformation de points QMC, mais par bootstrap sur une base de données, ce qui n'est pas forcément le cas des constructions plus optimales, comme celle composante par composante [NC06].

6.4 Conclusion

Nous souhaitons estimer la dispersion des valeurs de SIR d'un avion, calculée à partir du code numérique CRIRA, due à une connaissance partielle des caractéristiques de cet avion et à la variabilité des conditions météorologiques.

Nous avons tout d'abord étudié la significativité des différentes variables du code CRIRA pour le calcul de SIR. Pour cela, nous avons calculé les indices de Sobol fractionnaires de chacune des variables et de leurs interactions d'ordre 2. Nous avons effectué cette opération pour deux avions distincts. Les deux études de sensibilité ont mis en évidence que, dans les deux cas, seule une douzaine de variables étaient influentes pour le calcul de SIR. De plus, parmi ces douze variables, la majorité sont liées aux conditions atmosphériques ou aux conditions de vol. La faible influence des caractéristiques de l'avion sur le calcul de la SIR est due tout d'abord à l'angle de vue du capteur sur l'avion. En effet, une vue de face privilégie les émissions infrarouge de la structure de l'avion et des entrées d'air toutes deux influencées par les conditions de vol. Ensuite, la faible altitude de vol ainsi que la distance avion-capteur jouent un rôle déterminant sur la transmission du signal infrarouge et sur le rayonnement atmosphérique. Enfin, pour les deux scénarios, un grand nombre des caractéristiques de l'avion étaient fixées et par conséquent n'apparaissaient pas lors de l'analyse de sensibilité. Une comparaison des deux analyses de sensibilité a mis en évidence des dif-

férence notables entre les deux avions. Nous avons pu remarquer que la variable REGIME était plus significative pour le deuxième avion que le premier. De même, le classement des émissivités est différent pour les deux avions. Ces différences s'expliquent par la géométrie de la structure des deux avions.

Dans un second temps, nous avons estimé la fonction de répartition de la SIR calculée par le code CRIRA. Pour cela, nous avons utilisé l'algorithme 5.2 afin de sélectionner des points adaptés à la sortie du code CRIRA. Nous avons comparé les résultats obtenus avec deux jeux de paramètres (k_i, p_i) et en proposant des points pseudo-aléatoires à ceux obtenus avec 30000 points d'une suite de Faure classique. Les résultats obtenus semblent confirmer les conclusions du chapitre précédent. Plus précisément, en admettant les résultats obtenus avec 30000 points de la suite de Faure comme référence, nous avons pu observer que les points sélectionnés par l'algorithme incrémental dans une suite pseudo-aléatoire permettait d'obtenir des résultats meilleurs que la suite de Faure, lorsque celle-ci ne parvient pas à estimer convenablement la probabilité d'intérêt. En particulier, 10000 points sélectionnés par l'algorithme incrémental donnent une estimation plus proche de celle obtenue avec 30000 points d'une suite de Faure que les 10000 premiers points de cette même suite. Enfin, nous avons pu constater pour le second scénario, qu'une vitesse de décroissance de la discrétion plus sévère que celle attendue d'une suite aléatoire uniforme permettait d'obtenir une meilleure estimation de la probabilité d'intérêt que cette dernière uniquement lorsque la probabilité à estimer était très faible.

Les estimations ainsi obtenues mettent en évidence la différence entre les deux avions. En effet, nous avons pu constater que la probabilité que la SIR dépasse un seuil fixé est plus élevée pour le deuxième avion que celle du premier pour le même seuil. En outre, pour les deux avions, nous avons pu constater que, même pour de très faibles valeurs du seuil, la probabilité que la SIR soit inférieure à ce seuil était loin d'être négligeable. Cette situation s'explique par les mauvaises conditions météorologiques envisagées dans chacun des scénarios qui augmentent la proportion de valeurs nulles de SIR. Des conditions atmosphériques moins extrêmes pourraient sans doute conduire à des résultats très différents.

CONCLUSION

L'évolution rapide de l'informatique a favorisé l'apparition de gros codes numériques toujours plus précis mais également plus coûteux en temps de calcul et nécessitant un grand nombre de données d'entrées, qui ne sont pas toujours connues de manière précise. Dans ce cadre, l'Onera a développé un code de calcul de signature infrarouge d'un aéronef dans son environnement, CRIRA. En raison de l'incertitude sur les données d'entrée du code due à la méconnaissance des caractéristiques de l'avion et des conditions météorologiques variables, la connaissance d'une valeur de signature infrarouge correspondant à un jeu de données d'entrée fixé ne suffit plus. Ainsi l'Onera a souhaité utiliser CRIRA afin d'évaluer la dispersion de signature infrarouge due à cette incertitude sur les données d'entrée. La démarche générale que nous avons mise en place consiste, dans un premier temps, à identifier la significativité des variables de la fonction d'intérêt, associée au code de calcul. Plus précisément, nous avons effectué une analyse de variance fonctionnelle à partir d'un plan factoriel fractionnaire. Nous avons ainsi défini les indices de Sobol fractionnaires. Dans un deuxième temps, dans le but d'estimer la dispersion à l'aide d'une méthode de type quasi-Monte Carlo, nous avons utilisé ces indices pour définir un nouveau critère permettant d'évaluer l'adéquation d'une suite à la fonction d'intérêt, en terme de qualité de répartition des projections des points. Nous avons ensuite mis en œuvre ce critère pour construire une suite de points adaptée à la fonction d'intérêt. Enfin, nous avons appliqué notre démarche à la prédiction du gabarit de signature infrarouge.

Contrairement à l'approche par plan d'expériences, le calcul des indices de Sobol fractionnaires ne nécessite pas de supposer les résidus du modèle linéaire gaussiens. De plus, contrairement à l'analyse de variance fonctionnelle, les indices de Sobol fractionnaires autorisent la présence de variables corrélées tout en effectuant un nombre raisonnable de simulations. Toutefois, les fonctions possédant un terme en $(X^i)^2$ sont un cas typique pour lequel l'approximation des indices de Sobol par les indices de Sobol fractionnaires donne de mauvais résultats. En pratique, puisque la forme analytique exacte de la fonction est inconnue, un comportement en $(X^i)^2$ est difficile à prévoir. Cependant, il est toujours possible de tester la robustesse de l'estimation donnée par les indices de Sobol fractionnaires à l'aide d'une

validation croisée. Dans le pire des cas, si les indices fractionnaires ne sont pas robustes, il est possible d'utiliser une méthode classique d'estimation des indices de Sobol telle que la méthode de Sobol ou la méthode FAST. Rappelons que ces méthodes ne peuvent pas être utilisées pour des variables corrélées ou lorsque la dimension est grande et que le nombre d'évaluations de la fonction est restreint. Hormis pour les fonctions que nous venons de décrire, les résultats numériques nous ont montré que, dans la plupart des cas que nous avons testés, les indices de Sobol fractionnaires estiment relativement bien les indices de Sobol.

Par la suite nous avons utilisé la discrédance L_2 -étoile pondérée avec des poids particuliers, les indices de Sobol fractionnaires, permettant ainsi de juger la qualité de répartition des projections significatives pour la fonction d'intérêt d'une suite de points. Nous désignons alors ce critère par discrédance effective. D'après [SW98] il existe une borne de Koksma-Hlawka pour l'erreur d'intégration avec la discrédance L_2 -étoile pondérée. Nous avons souligné que cette borne pouvait s'énoncer en particulier avec la discrédance effective. Les tests numériques ont mis en évidence la pertinence de la discrédance effective même dans le cas d'une fonction indicatrice, pour décrire l'adéquation d'une suite à la fonction d'intérêt. Toutefois, la discrédance effective dépend des indices de Sobol fractionnaires. Dans les cas où ceux-ci donnent une mauvaise estimations des indices de Sobol, il est possible de les remplacer par une estimation obtenue par la méthode FAST ou la méthode de Sobol, pour peu que les variables soient indépendantes et que la dimension ne soit pas trop élevée. Les tests numériques ont également illustré l'importance du choix des projections constituant la discrédance effective. Ce choix doit être le plus plausible possible au regard de la fonction d'intérêt. Si ce choix s'avère difficile en raison d'une trop grande méconnaissance de la fonction, il est possible de prendre les sous-ensembles de variables de cardinal minimal ce qui revient à supposer que la fonction d'intérêt est de dimension effective faible au sens de la superposition. En pratique, les interactions d'ordre élevé sont souvent négligeables ce qui rend cette hypothèse réaliste. Bien que la discrédance effective permette de distinguer la suite la plus adaptée à la fonction d'intérêt en terme de répartition des projections, parmi un ensemble de suites, elle ne permet pas de savoir si la suite est proche de l'optimum pour notre fonction d'intérêt. C'est pourquoi nous avons souhaité construire une suite de points minimisant au mieux la discrédance effective.

La discrédance possède de nombreux minima locaux. Un algorithme d'échange simple risque de renvoyer une suite de points dont la discrédance effective est faible mais pas nécessairement optimale. Pour éviter de trouver une solution qui n'est que localement optimale, nous avons utilisé un algorithme de recuit simulé. Nous avons pu constater sur des tests numériques en petite dimension, que la minimisation de la discrédance effective permettait d'obtenir en moyenne une erreur d'intégration plus faible que la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. De plus, nous avons pu observer que, même en petite dimension, dans au moins 25% des cas, l'erreur d'intégration était plus faible que celle de la meilleure suite quasi-aléatoire. Cette amélioration peut sembler faible, cependant, en petite dimension notamment, les suites quasi-aléatoires usuelles permettent déjà d'obtenir de très bons résultats. Or, dans le cas de notre code informatique CRIRA, le nombre de variables est beaucoup plus élevé. De plus, pour des raisons de temps de calcul, l'algorithme de recuit simulé n'est envisageable que lorsque la dimension et le nombre de points sont faibles, à savoir une dimension inférieure à 10 et un nombre de points inférieure à 5000. Enfin, pour connaître le premier point, il est nécessaire d'attendre que la condition d'arrêt soit vérifiée, c'est à dire que la solution ne soit pas modifiée après avoir proposé un grand nombre d'échanges. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à une méthode incrémentale. Les résultats de tests numériques font apparaître que, pour une fonction polynomiale, la suite de points sélectionnée par l'algorithme incrémental peut donner une erreur d'intégration plus faible que celle des suites quasi-aléatoires usuelles. En revanche, pour l'estimation de l'intégrale d'une fonction indicatrice dépendant d'un seuil, qui s'apparente à la fonction de répartition de la fonction d'intérêt, l'amélioration de l'erreur d'intégration semble dépendre de la valeur du seuil ainsi que des paramètres de l'algorithme. Nous avons pu observer que, lorsque la valeur de l'intégrale n'est pas trop faible (ni trop élevée par complémentarité), la meilleure des suites quasi-aléatoires que nous avons testée permettait déjà d'obtenir une erreur relative de 0,1% avec 10 000 points. Il ne paraît donc pas très surprenant que les points sélectionnés par l'algorithme incrémental donnent une erreur d'intégration au mieux équivalente à celle de la meilleure suite quasi-aléatoire connue. De plus, nous avons pu noter que dans ce cas, sélectionner les points dans une suite présentant déjà une erreur d'intégration très faible pouvait conduire à une erreur d'intégration supérieure à celle obtenue avec

la suite initiale. Lorsque la valeur de l'intégrale est faible, on se rapproche de l'estimation de la probabilité d'occurrence d'un évènement rare. L'erreur d'intégration relative obtenue à l'aide de la meilleure suite quasi-aléatoire testée est alors de 10% avec 10000 points. Dans ce cas, lorsque les paramètres sont bien choisis, l'algorithme incrémental permet d'obtenir une erreur d'intégration relative nettement inférieure, de l'ordre de 1% avec 10000 points.

Lors de l'application de notre démarche au code CRIRA, dans un premier temps, nous avons évalué les indices de Sobol fractionnaires des variables d'entrée du code CRIRA et de leurs interactions d'ordre deux dans le cadre de deux scénarios qui ne diffèrent que par la catégorie d'avion utilisée. Ce calcul a mis en évidence que moins de la moitié des variables étaient réellement significatives pour le calcul de SIR pour les deux scénarios. La plupart des variables significatives sont liées, soit aux conditions météorologiques, soit aux conditions de vol. La faible contribution des variables liées aux caractéristiques de l'avion est due à la géométrie d'approche du scénario qui favorise l'apport des conditions de vol et météorologiques, par rapport aux émissivités de l'avion, sur l'émission infrarouge. Dans un second temps nous avons estimé la fonction de répartition de la SIR calculée par le code CRIRA, à l'aide de l'algorithme incrémental, pour chacun des scénarios. Les estimations obtenues nous ont permis de constater que les conditions météorologiques extrêmes, en particulier une visibilité pouvant être très faible, envisagées pour les deux scénarios, conduisaient à une probabilité non négligeable que la SIR de chacun des avions soit inférieure aux seuils envisagés. Des conditions moins extrêmes auraient sans doute mené à des conclusions très différentes.

Notre méthode de réduction de dimension permet d'identifier les variables significatives pour le code de calcul CRIRA en posant des hypothèses réalistes au regard du comportement de la SIR et des variables dont elle dépend. Les indices de Sobol fractionnaires, obtenus lors de la réduction de dimension, nous permettent, par la suite, de définir la discrédance effective et ainsi de juger l'adéquation d'une suite à la fonction d'intérêt dans le cadre de la méthode quasi-Monte Carlo. La mise en place d'un algorithme visant à minimiser la discrédance effective nous a permis de sélectionner une suite de points adaptée à la fonction d'intérêt et ainsi d'obtenir une erreur d'intégration faible.

Le calcul des indices de Sobol fractionnaires s'effectue à partir d'un plan factoriel fractionnaire à deux niveaux afin d'utiliser un faible nombre de simulations. Il pourrait être intéressant de généraliser ce procédé à des plans d'expériences factoriel fractionnaires à trois niveaux voire plus. Cette généralisation permettrait sans doute de réduire la classe des fonctions pour lesquelles les plans à deux niveaux sont insuffisants pour décrire la variation de la sortie due à la variation de chacune des entrées.

Les résultats numériques obtenus lors de l'application de l'algorithme de recuit simulé ont conforté l'idée que la minimisation de la discrédance effective permettait d'obtenir une erreur d'intégration plus faible que la minimisation de la discrédance en norme L_2 -étoile. Cependant, cet algorithme n'étant pas adapté à notre situation en raison du grand nombre de variables, nous n'avons pas fait varier la vitesse de décroissance de la température ni la longueur des paliers. Une étude approfondie des paramètres du recuit simulé, avec pour critère la discrédance effective, permettrait sans doute d'augmenter la proportion de suites meilleures que les suites quasi-aléatoires en terme d'erreur d'intégration. Les tests numériques effectués avec l'algorithme incrémental semblent prometteurs. Une étude théorique de la convergence de l'algorithme incrémental permettrait probablement d'appuyer et d'approfondir ces résultats. De plus, les résultats obtenus nous laissent penser que des paramètres différents pourraient éventuellement permettre d'obtenir de meilleurs résultats en terme d'erreur d'intégration.

Enfin, lors de l'application de notre démarche à l'estimation d'un gabarit de signature infrarouge, nous avons traité les variables corrélées par bootstrap à partir d'une base de données. Cette technique nous a permis de simuler la loi jointe des variables corrélées. Toutefois, la base de données est limitée. Une estimation de la densité jointe de ces variables permettrait de simuler leur comportement de manière plus précise. De plus, dans ce travail de thèse, nous avons uniquement envisagé des scénarios plaçant l'avion à suffisamment grande distance du capteur pour qu'il soit contenu dans un unique pixel du plan image. Dans ce cas non résolu, la sortie du code CRIRA peut être considérée comme un scalaire. Ce type de sortie est adaptée dans un objectif de détection, c'est à dire lorsque l'on souhaite savoir si oui ou non la signature dépassera le seuil avec la probabilité désirée. Néanmoins elle ne s'applique qu'aux capteurs imageurs dont la source de rayonnement est très faiblement résolue et aux capteurs de flux. La généralisation à l'ensemble des capteurs imageurs néces-

site de considérer que l'avion peut occuper plusieurs pixels. Dans ce cas résolu, la sortie du code CRIRA n'est plus un scalaire mais un vecteur. De plus, au-delà de l'étape de détection, on peut être amené à identifier le type d'avion détecté. Dans cet objectif d'identification, une approche consisterait, non plus à intégrer la signature infrarouge sur une large bande spectrale, mais à la considérer sur plusieurs bandes étroites. Là encore nous serions amenés à considérer une réponse vectorielle. Enfin, il serait également envisageable de combiner les deux, auquel cas la réponse deviendrait matricielle.

Ce travail de thèse nous a ainsi permis de développer une méthode statistique d'estimation de probabilités de dépassement de seuil de la signature infrarouge, dans un objectif de détection. Bien qu'il reste encore quelques points à approfondir, les premiers résultats sont très prometteurs.

Annexe I

Estimateurs MCP et MV

Estimateur des moindres carrés pondérés Dans le cas où les résidus ε_i , pour $i = 1, \dots, n$, du modèle linéaire 1.1 sont corrélés, qu'ils n'ont pas tous la même variance ($\exists i, j \in \{1, \dots, n\}$ tels que $\sigma_i^2 \neq \sigma_j^2$) et que la matrice de variance-covariance Σ est connue à une constante multiplicative près, l'estimateur des moindres carrés pondérés est donné par

$$\hat{\beta} = ({}^t M \Sigma^{-1} M)^{-1} {}^t M \Sigma^{-1} \vec{y}$$

où ${}^t M$ est la transposée de M .

Estimateur du maximum de vraisemblance Soit $(\mathcal{Y}, (P_\theta)_{\theta \in \Theta})$, où $\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^n$ et $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ est une famille de probabilités sur \mathcal{Y} , un modèle statistique de vraisemblance L :

$$\begin{aligned} L : \mathcal{Y} \times \Theta &\rightarrow \mathbb{R}^+ \\ (\vec{y}, \theta) &\mapsto L(\vec{y}, \theta). \end{aligned}$$

Un estimateur du maximum de vraisemblance pour θ est une statistique T telle que

$$\forall \vec{y} \in \mathcal{Y}, \quad L(\vec{y}, T(\vec{y})) = \sup_{\theta \in \Theta} L(\vec{y}, \theta).$$

En d'autre terme, pour chaque échantillon observé $\vec{y} = (y_1, \dots, y_n)$ de la variable aléatoire Y , l'estimateur du maximum de vraisemblance $T(\vec{y})$ est la valeur de θ qui maximise la densité jointe des observations (y_1, \dots, y_n) .

Dans le cadre du modèle linéaire 1.2 où l'on suppose les résidus gaussiens, corrélés, qu'ils n'ont pas tous la même variance ($\exists i, j \in \{1, \dots, n\}$ tels que $\sigma_i^2 \neq \sigma_j^2$) et que la matrice de variance-covariance Σ est connue, la vraisemblance s'écrit :

$$L(\vec{y}, \beta) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} (\det(\Sigma))^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t (\vec{y} - M\beta) \Sigma^{-1} (\vec{y} - M\beta)\right).$$

xiv

On voit alors que la valeur de β qui maximise $L(\vec{y}, \beta)$ est celle qui minimise la quantité

$${}^t(\vec{y} - M\beta)\Sigma^{-1}(\vec{y} - M\beta)$$

à savoir

$$\hat{\beta} = ({}^tM\Sigma^{-1}M)^{-1}{}^tM\Sigma^{-1}\vec{y}.$$

Annexe II

Les facteurs définis des plans factoriels fractionnaires

Facteurs définis des plans factoriels fractionnaires du chapitre 3

plan FF 2^{3-1} : $X^3 = X^1 X^2$.

plan FF 2^{20-11} P1 : $X^{10} = X^1 X^2 X^3 X^4$,

$$X^{12} = X^1 X^3 X^5 X^7,$$

$$X^{14} = X^2 X^3 X^5 X^8,$$

$$X^{16} = X^1 X^2 X^4 X^5 X^7 X^8,$$

$$X^{18} = X^1 X^2 X^3 X^5 X^6 X^7 X^8,$$

$$X^{20} = X^1 X^4 X^6 X^9.$$

$$X^{11} = X^1 X^2 X^5 X^6,$$

$$X^{13} = X^2 X^4 X^6 X^7,$$

$$X^{15} = X^1 X^2 X^4 X^6 X^8,$$

$$X^{17} = X^1 X^3 X^4 X^6 X^7 X^8,$$

$$X^{19} = X^1 X^2 X^3 X^5 X^9,$$

plan FF 2^{20-11} P2 : $X^{11} = X^{20} X^{19} X^{18} X^{17}$,

$$X^9 = X^{20} X^{18} X^{16} X^{14},$$

$$X^7 = X^{19} X^{18} X^{15} X^{13},$$

$$X^5 = X^{20} X^{19} X^{17} X^{16} X^{14} X^{13},$$

$$X^3 = X^{20} X^{19} X^{18} X^{16} X^{15} X^{14} X^{13},$$

$$X^1 = X^{20} X^{17} X^{15} X^{12}.$$

$$X^{10} = X^{20} X^{19} X^{16} X^{15},$$

$$X^8 = X^{19} X^{17} X^{16} X^{14},$$

$$X^6 = X^{20} X^{19} X^{17} X^{15} X^{13},$$

$$X^4 = X^{20} X^{18} X^{17} X^{15} X^{14} X^{13},$$

$$X^2 = X^{20} X^{19} X^{18} X^{16} X^{12},$$

plan FF 2^{20-10} P1 : $X^{11} = X^4 X^5 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10}$,

$$X^{13} = X^1 X^2 X^3 X^4 X^5 X^7 X^8 X^9 X^{10},$$

$$X^{15} = X^2 X^4 X^8 X^9 X^{10},$$

$$X^{17} = X^1 X^4 X^7 X^9 X^{10},$$

$$X^{19} = X^1 X^3 X^4 X^6 X^7 X^8 X^{10},$$

$$X^{12} = X^2 X^3 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10},$$

$$X^{14} = X^1 X^3 X^5 X^6 X^8 X^9 X^{10},$$

$$X^{16} = X^1 X^2 X^5 X^6 X^7 X^9 X^{10},$$

$$X^{18} = X^1 X^2 X^3 X^4 X^6 X^9 X^{10},$$

$$X^{20} = X^1 X^5 X^7 X^8 X^{10}.$$

plan FF 2^{20-10} P2 : $X^{10} = X^{17} X^{16} X^{15} X^{14} X^{13} X^{12} X^{11}$,

$$X^8 = X^{20} X^{19} X^{18} X^{17} X^{16} X^{14} X^{13} X^{12} X^{11},$$

$$X^6 = X^{19} X^{17} X^{13} X^{12} X^{11},$$

$$X^4 = X^{20} X^{17} X^{14} X^{12} X^{11},$$

$$X^2 = X^{20} X^{18} X^{17} X^{15} X^{14} X^{13} X^{11},$$

$$X^9 = X^{19} X^{18} X^{15} X^{14} X^{13} X^{12} X^{11},$$

$$X^7 = X^{20} X^{18} X^{16} X^{15} X^{13} X^{12} X^{11},$$

$$X^5 = X^{20} X^{19} X^{16} X^{15} X^{14} X^{12} X^{11},$$

$$X^3 = X^{20} X^{19} X^{18} X^{17} X^{15} X^{12} X^{11},$$

$$X^1 = X^{20} X^{16} X^{14} X^{13} X^{11}.$$

Facteurs définis des plans factoriels fractionnaires du chapitre 4

$$\begin{aligned}
\text{plan FF } 2^{20-10} : \quad & X^{11} = X^4 X^5 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10}, & X^{12} &= X^2 X^3 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10}, \\
& X^{13} = X^1 X^2 X^3 X^4 X^5 X^7 X^8 X^9 X^{10}, & X^{14} &= X^1 X^3 X^5 X^6 X^8 X^9 X^{10}, \\
& X^{15} = X^2 X^4 X^8 X^9 X^{10}, & X^{16} &= X^1 X^2 X^5 X^6 X^7 X^9 X^{10}, \\
& X^{17} = X^1 X^4 X^7 X^9 X^{10}, & X^{18} &= X^1 X^2 X^3 X^4 X^6 X^9 X^{10}, \\
& X^{19} = X^1 X^3 X^4 X^6 X^7 X^8 X^{10}, & X^{20} &= X^1 X^5 X^7 X^8 X^{10}. \\
\text{plan FF } 2^{6-1} : \quad & X^6 = X^1 X^2 X^3 X^4 X^5
\end{aligned}$$

Facteurs définis des plans factoriels fractionnaires du chapitre 5

$$\begin{aligned}
\text{plan FF } 2^{30-19} : \quad & X^{12} = X^1 X^2 X^3 X^4 X^5 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10} X^{11}, & X^{13} &= X^5 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{10} X^{11}, \\
& X^{14} = X^3 X^4 X^7 X^8 X^9 X^{10} X^{11}, & X^{15} &= X^2 X^4 X^6 X^8 X^9 X^{10} X^{11}, \\
& X^{16} = X^1 X^3 X^5 X^8 X^9 X^{10} X^{11}, & X^{17} &= X^1 X^4 X^6 X^7 X^9 X^{10} X^{11}, \\
& X^{18} = X^1 X^2 X^5 X^7 X^9 X^{10} X^{11}, & X^{19} &= X^1 X^2 X^3 X^6 X^9 X^{10} X^{11}, \\
& X^{20} = X^2 X^3 X^4 X^5 X^9 X^{10} X^{11}, & X^{21} &= X^2 X^3 X^6 X^7 X^8 X^{10} X^{11}, \\
& X^{22} = X^1 X^2 X^4 X^7 X^8 X^{10} X^{11}, & X^{23} &= X^1 X^4 X^5 X^6 X^8 X^{10} X^{11}, \\
& X^{24} = X^3 X^4 X^5 X^6 X^7 X^{10} X^{11}, & X^{25} &= X^1 X^3 X^6 X^7 X^8 X^9 X^{11}, \\
& X^{26} = X^2 X^7 X^8 X^9 X^{11}, & X^{27} &= X^1 X^2 X^5 X^6 X^8 X^9 X^{11}, \\
& X^{28} = X^1 X^3 X^4 X^9 X^{11}, & X^{29} &= X^2 X^5 X^8 X^9 X^{10}, \\
& X^{30} = X^2 X^3 X^5 X^6 X^7 X^9 X^{10},
\end{aligned}$$

Facteurs définis des plans factoriels fractionnaires du chapitre 6

plan FF 2^{28-17} :

<i>REGIME</i> =	<i>EPAISS * HBASE * IHAZE * VIS * NUAGES * IDAY * HEURE * DELTAT * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>MACH</i> =	<i>NUAGES * IDAY * HEURE * DELTAT * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>CAP</i> =	<i>IHAZE * VIS * HEURE * DELTAT * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>ASSIETTE</i> =	<i>HBASE * VIS * IDAY * DELTAT * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>GITE</i> =	<i>EPAISS * IHAZE * NUAGES * DELTAT * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>GISEMENT</i> =	<i>EPAISS * VIS * IDAY * HEURE * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>E_B_ATTA</i> =	<i>EPAISS * HBASE * NUAGES * HEURE * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>E_NEZ_INTR</i> =	<i>EPAISS * HBASE * IHAZE * IDAY * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>E_B_FUIT</i> =	<i>HBASE * IHAZE * VIS * NUAGES * H2 * SALB * MODEL</i>
<i>E_FUSE</i> =	<i>HBASE * IHAZE * IDAY * HEURE * DELTAT * SALB * MODEL</i>
<i>E_TUY_INT</i> =	<i>EPAISS * HBASE * VIS * HEURE * DELTAT * SALB * MODEL</i>
<i>E_F_TUY</i> =	<i>EPAISS * VIS * NUAGES * IDAY * DELTAT * SALB * MODEL</i>
<i>E_TUY_EXT</i> =	<i>IHAZE * VIS * NUAGES * IDAY * HEURE * SALB * MODEL</i>
<i>E_E_AI</i> =	<i>EPAISS * IHAZE * IDAY * HEURE * DELTAT * H2 * MODEL</i>
<i>E_VER</i> =	<i>HBASE * HEURE * DELTAT * H2 * MODEL</i>
<i>RH</i> =	<i>EPAISS * HBASE * NUAGES * IDAY * DELTAT * H2 * MODEL</i>
<i>TA</i> =	<i>EPAISS * IHAZE * VIS * H2 * MODEL</i>

LISTE DES TABLEAUX

2.I	Récapitulatif des propriétés des différentes suites à discrédance faible	66
3.I	Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction linéaire	86
3.II	Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire, plan 1	87
3.III	Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire, plan 3	87
3.IV	Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire, plan 3	88
3.V	Indices de Sobol fractionnaires pour une fonction non-linéaire non monotone	90
3.VI	Liste des coefficients pour la fonction f_4	91
3.VIII	Les 10 premiers indices de Sobol du premier ordre pour la fonction f_4	91
6.I	description et valeurs des variables en entrée du code CRIRA, non fixées par le scénario	151
6.II	Classements des variables en fonction des indices de Sobol fractionnaires pour le scénario 1	153
6.III	Classements des variables en fonction des indices de Sobol fractionnaires pour le scénario 2	156
6.IV	Récapitulatif des estimations de la probabilité de ne pas dépasser le seuil pour le scénario 2	169
6.V	Récapitulatif des estimations de la probabilité de ne pas dépasser le seuil pour les deux scénarios	170

LISTE DES FIGURES

1	Différence entre probabilité de détection et gabarit de SIR	4
1.1	Un plan factoriel complet	14
2.1	Points issus d'un générateur de nombre pseudo-aléatoires	34
2.2	Un hypercube latin	37
2.3	Illustration de la notion de discrédance	39
2.4	Une suite de Van Der Corput	53
2.5	Une suite de Halton	54
2.6	Une suite de Sobol	57
2.7	Une suite de Faure	58
2.8	Un (t, m, s) -réseau	61
2.9	Influence du paramètre t et de la base b sur la constantes de majorations de la discrédance infinie	63
2.10	Constantes de majorations de la discrédance infinie donnée par différents théorèmes	63
2.11	Illustration des irrégularités de répartition des suites de Halton	67
2.12	Projection d'une suite de Sobol	68
2.13	Projection d'une suite de Faure	68
2.14	Projection d'une suite de Faure après scrambling	70
2.15	Projection d'une suite de Faure après scrambling	71
4.1	Projections sur (X^1, X^3) de deux suites de Halton	99
4.2	Projections sur (X^2, X^4) de deux suites de Halton	99
4.3	Discrédance effective de 2 suites de Halton pour la fonction h_1	100
4.4	Comparaison entre différentes discrédances de 2 suites de Halton	100
4.5	Erreur d'intégration avec 2 suites de Halton pour h_1	102
4.6	Erreur d'intégration et discrédance effective avec plusieurs suites pour h_1	102
4.7	Erreur d'intégration et discrédance effective avec une suite de Halton pour h_1	104

4.8	Erreur d'intégration et discrédance effective de suites de Halton prolongées pour h_1	105
4.9	Erreur d'intégration et discrédance effective de suites de Halton prolongées pour h_1	106
4.10	Discrédance effective de 4 suites de Halton pour une fonction indicatrice . . .	109
4.11	Erreur relative de 4 suites de Halton pour une fonction indicatrice	110
4.12	Erreur relative et discrédance effective avec indices de Sobol fractionnaires erronés	111
4.13	Erreur et discrédance effective avec choix des projections erroné	113
5.1	Erreur d'intégration de la sélection avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$	123
5.2	Erreur et discrédance de la sélection avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$	124
5.3	Erreur relative et moyenne glissante de l'erreur relative de la sélection avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{60}{i}$	126
5.4	Erreur de la sélection avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2*s}{i}$	127
5.5	Erreur et discrédance de la sélection avec $k_i = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}$ et $p_i = \frac{50}{i}$	129
5.6	Erreur d'intégration de la sélection avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2*6}{i}$	130
5.7	Discrédance effective de la sélection avec $k_i = \frac{i^2}{(i-1)^2}$ et $p_i = \frac{2*6}{i}$	131
5.8	Box Plot de l'erreur relative après recuit simulé	132
5.9	Erreur d'intégration de la sélection avec $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$	135
5.10	Erreur d'intégration de la sélection avec $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$	136
5.11	Erreur d'intégration de la sélection avec $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$ pour indicatrice à seuil élevé	137
5.12	Erreur d'intégration de la sélection avec $(k_i; p_i) = (\frac{\sqrt{i}}{\sqrt{i-1}}; \frac{50}{i})$ et $(k_i; p_i) = (\frac{i^2}{(i-1)^2}; \frac{2*30}{i})$	138
6.1	Images de la SIR d'un aéronef de combat standard estimée par CRIRA	146
6.2	Fonction de répartition de la SIR scénario 1	164
6.3	Fonction de répartition de la SIR scénario 1	165

6.4	Fonction de répartition de la SIR scénario 1	167
6.5	Fonction de répartition de la SIR scénario 1	168
6.6	Fonction de répartition de la SIR pour les 2 scénarios	171

LISTE DES ANNEXES

Annexe I :	Estimateurs MCP et MV	xiii
Annexe II :	Les facteurs définis des plans factoriels fractionnaires . . .	xv

Index

- algorithme
 - à seuil, 72
 - d'échange, 71
 - de recuit simulé, 72
 - évolutionniste, 73
 - incrémental, 118
- alias, 21
- dimension effective
 - au sens de la superposition, 25
 - au sens de la troncature, 24
- discrépance, 39
 - carrée moyenne, 42
 - effective, 95
 - infinie
 - à l'origine, 40
 - locale, 39
 - pondérée, 43
- effet, 13, 16
 - d'interaction, 13
 - principal, 13, 16
- équirépartition, 40
- expérience, 13
- facteur, 12
- FANOVA, 22
- FAST, 26
- Faure (suite de), 58
- Fisher (test de), 17
- Halton (suite de), 54
- Hammersley (suite de), 56
- hypercube latin (LHS), 35
- indice de Sobol, 24
 - fractionnaire, 83
- inégalité de Koksma-Hlawka, 46
 - pondérée, 48
- interaction, 13, 15
 - ordre d'une, 15
- modèle linéaire, 10, 15
- moindres carrés, 11
- Niederreiter (suite de), 64
- niveau, 13
- pavé élémentaire, 60
- plan d'expériences, 9, 13
- plan factoriel, 14
 - asymétrique, 14
 - complet (FC), 14

- fractionnaire (FF), 19
 - symétrique, 14
- plan U-type, 72
- quasi-Monte Carlo, 38
- réponse, 12
- résolution, 21
- Sobol (indice de), 24
- Sobol (suite de), 57
- (t, m, s) -réseau, 60
- (t, s) -suite, 60
- Van Der Corput (suite de), 52
- variation
 - au sens de Hardy-Krause, 46
 - au sens de Vitali, 45

BIBLIOGRAPHIE

- [AB06] J. AZAÏS et J. BARDET – *Le modèle linéaire par l'exemple*, Dunod, 2006.
- [ABG98] P. ACWORTH, M. BROADIE et P. GLASSERMAN – « A comparison of some Monte Carlo and quasi-Monte Carlo techniques for option pricing », *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 1996 (Salzburg)*, Lecture Notes in Statistics, vol. 127, Springer, New York, 1998, p. 1–18.
- [ACL09] A. AVRAMIDIS, N. CHANNOUF et P. L'ECUYER – « Efficient correlation matching for fitting discrete multivariate distributions with arbitrary marginals and normal copula dependence », *INFORMS Journal of Computing* **21** (2009), p. 88–106.
- [AG07] S. ASMUSSEN et P. GLYNN – *Stochastic simulation*, Springer-Verlag, New-York, 2007.
- [ASS97] G. ARCHER, A. SALTELLI et I. SOBOL – « Sensitivity measures, anova-like techniques and the use of bootstrap », *Journal of Statistical Computation and Simulation* **58** (1997), p. 99–120.
- [Ata04] E. I. ATANASSOV – « On the discrepancy of the Halton sequences », *Mathematica Balkanica* **18** (2004), no. 1-2, p. 15–32.
- [BDG⁺82] P. BOUCHARDY, G. DURAND, G. GAUFFRE, SELVA et GIACOMETTI – « Theoretical and experimental study of infrared radiation from helicopters », *Paper No. 8.6, Eighth European Rotorcraft Forum, Aix-en-Provence, France, August 31-September 3, August 31-September 3 1982*.
- [BF88] P. BRATLEY et B. L. FOX – « Algorithm 659 : Implementing Sobol's quasi-random sequence generator », *ACM Transactions on Mathematical Software* **14** (1988), no. 1, p. 88–100.

- [BFN92] P. BRATLEY, B. L. FOX et H. NIEDERREITER – « Implementation and tests of low-discrepancy sequences. », *ACM : Transactions on Modeling and Computer Simulation* **2** (1992), no. 3, p. 195–213 (English).
- [BW79] E. BRAATEN et G. WELLER – « An improved low-discrepancy sequence for multidimensional quasi-Monte Carlo integration », *Journal of Computational Physics* **33** (1979), no. 2, p. 249–258.
- [BZ93] P. BUNDSCHUH et Y. ZHU – « A method for exact calculation of the discrepancy of low-dimensional finite point sets. I. », *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg* **63** (1993), p. 115–133.
- [CFS⁺73] R. I. CUKIER, C. M. FORTUIN, K. E. SHULER, A. G. PETSCHKEK et J. H. SCHAIBLY – « Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory », *The Journal of Chemical Physics* **59** (1973), no. 8, p. 3873–3878.
- [Cle86] L. D. CLERCK – « A method for exact calculation of the star-discrepancy of plane sets applied to the sequences of Hammersley », *Monatshefte für Mathematik* **101** (1986), p. 261–278.
- [CLM⁺99] A. T. CLAYMAN, K. M. LAWRENCE, G. L. MULLEN, H. NIEDERREITER et N. J. A. SLOANE – « Updated tables of parameters of (t, m, s) -nets », *Journal of Combinatorial Designs* **7** (1999), no. 5, p. 381–393.
- [CLS78] R. I. CUKIER, H. LEVINE et K. SHULER – « Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems », *Journal of Computational Physics* **26** (1978), no. 1, p. 1–42.
- [CMO97] R. E. CAFLISCH, W. MOROKOFF et A. B. OWEN – « Valuation of mortgage backed securities using brownian bridges to reduce effective dimension », *Journal of Computational Finance* **1** (1997), no. 1, p. 27–46.
- [CSS75] R. I. CUKIER, J. H. SCHAIBLY et K. E. SHULER – « Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. iii. analysis

- of the approximations », *The Journal of Chemical Physics* **63** (1975), no. 3, p. 1140–1149.
- [DFS02] J.-J. DROESBEKE, J. FINE et G. SAPORTA – *Plans d’expériences. applications à l’entreprise*, Technip, 2002.
- [DR84] P. J. DAVIS et P. RABINOWITZ – *Methods of numerical integration*, Computer Science and Applied Mathematics, Academic press, 1984.
- [dRDT08] E. DE ROCQUIGNY, N. DEVICTOR et S. TARANTOLA – *Uncertainty in industrial practice : A guide to quantitative uncertainty management*, John Wiley and Sons, 2008.
- [ES81] B. EFRON et C. STEIN – « The jackknife estimate of variance », *The Annals of Statistics* **9** (1981), no. 3, p. 586–596.
- [Fau81] H. FAURE – « Discrépance de suites associées à un système de numération (en dimension 1). », *Bulletin de la Société Mathématique de France* **109** (1981), p. 143–182.
- [Fau82] H. FAURE – « Discrepance de suites associées à un système de numération (en dimension s). », *Acta Arithmetica* **41** (1982), p. 337–351 (French).
- [FH95] K.-T. FANG et F. J. HICKERNELL – « The uniform design and its applications », *Bulletin of the International Statistical Institute* (1995), p. 339–349.
- [Fin45] D. J. FINNEY – « The fractional replication of factorial arrangements », *Annals of Eugenics* **12** (1945), p. 291–301.
- [Fis35] R. A. FISHER – *The design of experiments*, Oliver & Boyd, Edinburgh, 1935.
- [FL09] H. FAURE et C. LEMIEUX – « Generalized Halton sequences in 2008 : A comparative study », *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* **19** (2009), no. 4, p. article 15.

- [FLW03] K.-T. FANG, X. LU et P. WINKER – « Lower bounds for centered and wrap-around L_2 -discrepancies and construction of uniform designs by threshold accepting », *Journal of Complexity* **19** (2003), no. 5, p. 692–711.
- [FM01] K.-T. FANG et C.-X. MA – « Wrap-around L_2 -discrepancy of random sampling, Latin hypercube and uniform designs », *Journal of Complexity* **17** (2001), p. 608–624.
- [FMTW06] K.-T. FANG, D. MARINGER, Y. TANG et P. WINKER – « Lower bounds and stochastic optimization algorithms for uniform designs with three or four levels », *Mathematics of Computation* **75** (2006), no. 254, p. 859–878.
- [FMW02] K.-T. FANG, C. X. MA et P. WINKER – « Centered L_2 -discrepancy of random sampling and Latin hypercube design, and construction of uniform designs », *Mathematics of Computation* **71** (2002), no. 237, p. 275–296.
- [FTY05] K.-T. FANG, Y. TANG et J. YIN – « Lower bounds for wrap-around L_2 -discrepancy and constructions of symmetrical uniform designs », *Journal of Complexity* **21** (2005), no. 5, p. 757–771.
- [Gau81] G. GAUFFRE – « Aircraft infrared radiation modeling », *La Recherche Aérospatiale* **4** (1981), p. 245–265.
- [Gou03] J. GOUPY – *Introduction aux plans d'expériences*, 2003.
- [Hal60] J. H. HALTON – « On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals », *Numerische Mathematik* **2** (1960), p. 84–90.
- [Ham60] J. M. HAMMERSLEY – « Monte Carlo methods for solving multivariable problems », *Annals of the New-York academy of sciences* **86** (1960), p. 844–874.
- [HH64] J. M. HAMMERSLEY et D. C. HANDSCOMB – *Monte Carlo methods*, 1964.

- [Hic98] F. J. HICKERNELL – « A generalized discrepancy and quadrature error bound. », *Mathematics of Computation* **67** (1998), no. 221, p. 299–322 (English).
- [Hic00] F. J. HICKERNELL – « What affects the accuracy of quasi-Monte Carlo quadrature? », *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 1998* (Claremont, CA), Springer, 2000, p. 16–55.
- [Hla61] E. HLAWKA – « Funktionen von beschränkter variation in der theorie der gleichverteilung », *Annali di Matematica Pura ed Applicata* **54** (1961), p. 325–333.
- [Hoe48] W. HOEFFDING – « A class of statistics with asymptotically normal distributions », *Annals of Mathematical Statistics* **19** (1948), p. 293–325.
- [HS95] T. HOMMA et A. SALTELLI – « Use of Sobol’s quasi-random sequence generator for integration of modified uncertainty importance measure », *Journal of Nuclear Science and Technology* **32** (1995), no. 11, p. 1164–1173.
- [IT06] J. IMAI et K. S. TAN – « A general dimension reduction technique for derivative pricing », *Journal of Computational Finance* **10** (2006), no. 2, p. 129–155.
- [JCS05] R. JIN, W. CHEN et A. SUDJANTO – « An efficient algorithm for constructing optimal design of computer experiments », *Journal of Statistical Planning and Inference* **134** (2005), p. 268–287.
- [JF09] A. JOURDAN et J. FRANCO – « A new criterion based on Kullback-Leibler information for space filling designs », *HAL : hal-00375820, version 1* (2009).
- [Joe97] S. JOE – « Formulas for the computation of the weighted L_2 -discrepancy », Tech. Report 55, University of Waikato, School of Computing and Mathematical Sciences, Dept of Mathematics Research, 1997.
- [Kie61] J. KIEFER – « On large deviations of the empiric d.f. of vector chance variables and a law of the iterated logarithm », *Pacific Journal of Mathematics* **11** (1961), p. 649–660.

- [Kle08] J. P. KLEIJNEN – *Design and analysis of simulation experiments*, Springer, 2008.
- [Knu69] D. E. KNUTH – *The art of computer programming : seminumerical algorithms*, Addison Wesley, 1969.
- [Kri05] P. KRITZER – « A new upper bound on the star discrepancy of (0,1)-sequences », *Integers, Electronic journal of combinatorial number theory* **5** (2005), no. 3, p. A11.
- [KW97] L. KOCIS et W. J. WHITEN – « Computational investigations of low-discrepancy sequences », *ACM Transactions on Mathematical Software* **23** (1997), no. 2, p. 266–294.
- [L'E01] P. L'ECUYER – « Software for uniform random number generation : distinguishing the good and the bad », *Proceedings of the 2001 Winter Simulation Conference* (B. A. Peters, J. S. Smith, D. J. Medeiros et M. W. Rohrer, éd.), 2001, p. 95–105.
- [L'E04] — , « Quasi-Monte Carlo methods in finance », *Proceedings of the 2004 Winter Simulation Conference* (R. G. Ingalls, M. D. Rossetti, J. S. Smith et B. A. Peters, éd.), IEEE Press, 2004, p. 1645–1655.
- [L'E09] — , « Quasi-Monte Carlo methods with applications in finance », *Finance and Stochastics* **13** (2009), no. 3, p. 307–349.
- [Lef06] S. LEFEBVRE – « Gabarits de sir. etude théorique », Tech. Report 4/08479 DOTA, Onera, juillet 2006.
- [LL02] P. L'ECUYER et C. LEMIEUX – « Recent advances in randomized quasi-Monte Carlo methods », *Modeling uncertainty, Internat. Ser. Oper. Res. Management Sci.*, vol. 46, Kluwer Acad. Publ., Boston, MA, 2002, p. 419–474.

- [LO06] R. LIU et A. B. OWEN – « Estimating mean dimensionality of analysis of variance decompositions », *Journal of the american statistical association* **101** (2006), no. 474, p. 712–721.
- [LP94] P. L'ECUYER et G. PERRON – « On the convergence rates of IPA and FDC derivative estimators », *Operations Research* **42** (1994), no. 4, p. 643–656.
- [Mat98] J. MATOUŠEK – « On the L_2 -discrepancy for anchored boxes. », *Journal of Complexity* **14** (1998), no. 4, p. 527–556 (English).
- [MBC79] M. D. MCKAY, R. J. BECKMAN et W. J. CONOVER – « A comparison of three methods of selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code », *Technometrics* **21** (1979), p. 239–245.
- [MC94] W. J. MOROKOFF et R. E. CAFLISCH – « Quasi-random sequences and their discrepancies. », *SIAM Journal on Scientific Computing* **15** (1994), no. 6, p. 1251–1279 (English).
- [MC95] —, « Quasi-Monte Carlo integration. », *Journal of Computational Physics* **122** (1995), no. 2, p. 218–230 (English).
- [MC04] M. MASCAGNI et H. CHI – « On the scrambled Halton sequence », *Monte Carlo Methods and Applications* **10** (2004), no. 3, p. 435–442.
- [Mei68] H. G. MEIJER – « The discrepancy of a g-adic sequence », *Nederlandse Akademie van Wetenschappen. Proceedings. Series A. Indagationes Mathematicae* **71** (1968), p. 54–66.
- [MM95] M. D. MORRIS et T. J. MITCHELL – « Exploratory designs for computational experiments », *Journal of Statistical Planning and Inference* **43** (1995), p. 381–402.
- [MMN95] G. L. MULLEN, A. MAHALANABIS et H. NIEDERREITER – « Tables of (t, m, s) -net and (t, s) -sequence parameters », *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods in scientific computing* (H. Niederreiter, éd.), Lecture Notes in Statistics,

vol. 106, Proceedings of a conference at the University of Nevada, Las Vegas, Nevada, USA, June 23-25, 1994, Springer-Verlag, 1995.

- [Mon05] D. C. MONTGOMERY – *Design and analysis of experiments*, 6th éd., John Wiley and Sons, 2005.
- [NC06] D. NUYENS et R. COOLS – « Fast component-by-component construction of rank-1 lattice rules with a non-prime number of points », *Journal of Complexity* **22** (2006), p. 4–28.
- [Nel99] R. NELSEN – « An introduction to copulas », *Lecture Notes in Statistics*, Springer-Verlag, New-York, 1999.
- [Nie72] H. NIEDERREITER – « Discrepancy and convex programming », *Annali di Matematica Pura ed Applicata* **93** (1972), no. 1, p. 89–97.
- [Nie87] — , « Point sets and sequences with small discrepancy. », *Monatshefte fuer Mathematik* **104** (1987), p. 273–337 (English).
- [Nie88] — , « Low-discrepancy and low-dispersion sequences », *Journal of Number Theory* **30** (1988), p. 51–70.
- [Nie92] — , *Random number generation and quasi-Monte Carlo methods*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. 63. Philadelphia, PA : SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics. vi, 241 p., 1992.
- [NT96] S. NINOMIYA et S. TEZUKA – « Toward real-time pricing of complex financial derivatives », *Applied Mathematical Finance* **3** (1996), no. 1, p. 1–20.
- [Owe92] A. B. OWEN – « Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization. », *Statistica Sinica* **2** (1992), no. 2, p. 439–452 (English).
- [Owe95] A. B. OWEN – « Randomly permuted (t,m,s)-nets and (t,s)-sequences », *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing* (H. Niederreiter et P. J.-S. Shiue, éd.), Springer-Verlag, New York, 1995, p. 299–317.

- [Owe98a] A. B. OWEN – « Latin supercube sampling for very high-dimensional simulations », *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* **8** (1998), no. 1, p. 71–102.
- [Owe98b] A. B. OWEN – « Scrambling Sobol and Niederreiter-Xing points », *Journal of Complexity* **14** (1998), p. 466–489.
- [PDDAP05] L. PIBOULEAU, S. DOMENECH, A. DAVIN et C. AZZARO-PANTEL – « Expérimentation numériques sur les variantes et paramètres de la méthode du recuit simulé », *Chemical Engineering Journal* **105** (2005), no. 3, p. 117–130.
- [PT95] S. PASKOV et J. TRAUB – « Faster valuation of financial derivatives », *Journal of Portfolio Management* (1995).
- [Rot54] K. F. ROTH – « On irregularities of distribution », *Mathematika* **1** (1954), p. 73–79.
- [Sap06] G. SAPORTA – *Probabilités, analyse des données et statistique*, Paris : Ed. Technip, 2006.
- [SCS00] A. SALTELLI, K. CHAN et M. SCOTT – *Sensitivity analysis*, Wiley Series in Probability and Statistics. New York : John Wiley and Sons, 2000.
- [Sob67] I. M. SOBOL – « On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals », *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* **7** (1967), no. 4, p. 86–112.
- [Sob90] — , « Sensitivity estimates for non-linear mathematical models », *Matematicheskoe Modelirovanie* **2** (1990), no. 1, p. 112–118.
- [Sob95] — , « Sensitivity analysis for non-linear mathematical models : numerical experience », *Matematicheskoe Modelirovanie* **7** (1995), no. 11, p. 16–28.
- [SPKA01] T. W. SIMPSON, J. PEPLINSKI, P. N. KOCHH et J. K. ALLEN – « Metamodels for computer-based engineering design : survey and recommendations », *Engineering with Computers* **17** (2001), no. 2, p. 129–150.

- [SS73] J. H. SCHAIBLY et K. E. SHULER – « Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. ii applications », *The Journal of Chemical Physics* **59** (1973), no. 8, p. 3879–3888.
- [STC99] A. SALTELLI, S. TARANTOLA et K. P.-S. CHAN – « A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output », *Technometrics* **41** (1999), no. 1, p. 39–56.
- [Ste87] M. STEIN – « Large sample properties of simulations using Latin hypercube sampling », *Technometrics* **29** (1987), p. 143–151.
- [SW98] I. H. SLOAN et H. WOŹNIAKOWSKI – « When are quasi-Monte Carlo algorithms efficient for high dimensional integrals? », *Journal of Complexity* **14** (1998), no. 1, p. 1–33 (English).
- [TF03] S. TEZUKA et H. FAURE – « I-binomial scrambling of digital nets and sequences », *Journal of complexity* **19** (2003), p. 744–757.
- [Tuf96a] B. TUFFIN – « Improvement of Halton sequences distribution », Tech. Report 998, IRISA, 1996.
- [Tuf96b] — , « On the use of low discrepancy sequences in Monte Carlo methods », Tech. Report 1060, IRISA, 1996.
- [Tuf97] — , « A new permutation choice in Halton sequences », *Second International Conference on Monte Carlo and quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing 1996, Lecture Notes in Statistics* (H. Niederreiter, P. Hellekalek, G. Larcher et P. Zinterhof, éd.), vol. 127, Springer Verlag, New-York, 1997, p. 427–435.
- [VC06] B. VANDEWOESTYNE et R. COOLS – « Good permutations for deterministic scrambled Halton sequences in terms of L_2 -discrepancy », *Journal of Computational and Applied Mathematics* **189** (2006), p. 341–361.

- [War72] T. T. WARNOCK – « Computational investigations of low-discrepancy point sets », *Applications of number theory to numerical analysis Proc. Sympos. Univ. Montreal 1971*, 319-343 (1972), 1972, p. 319–343.
- [WF98] P. WINKER et K.-T. FANG – « Optimal u-type design », *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods* (H. Niederreiter, P. Zinterhof et P. Hellekalek, édés.), Springer, 1998, p. 436–448.
- [Zar68] S. K. ZAREMBA – « The mathematical basis of Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods », *SIAM Review* **10** (1968), no. 3, p. 303–314.
- [Zar71] — , « Sur la discrèpance des suites aléatoires », *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete* **20** (1971), p. 236–248.