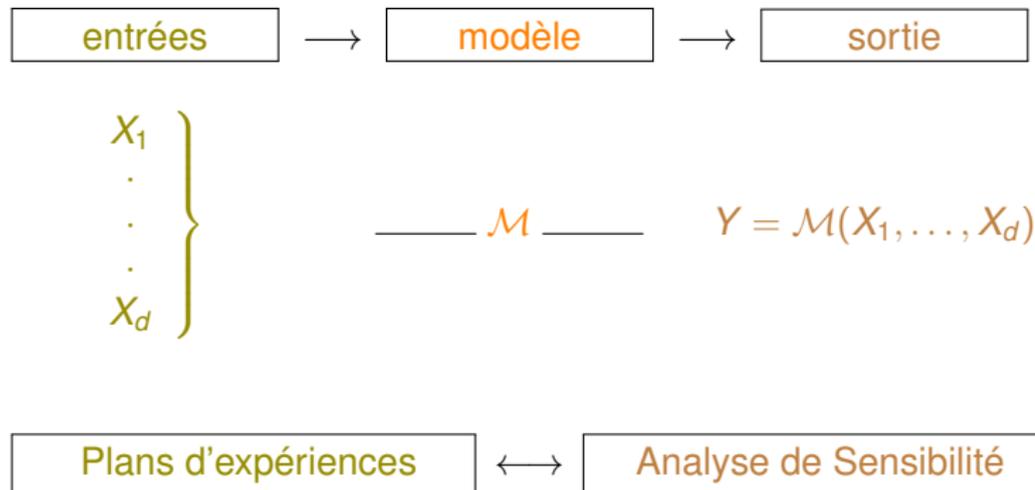


Analyse de Sensibilité Globale

Clémentine Prieur, Laurent Gilquin

Pec'num²⁰¹⁵

École Centrale de Lyon, 21 mai 2015



Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \mapsto y = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- ▶ analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- ▶ analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \mapsto y = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- ▶ analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- ▶ analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Contexte :

$$\mathcal{M} : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \rightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \mapsto y = \mathcal{M}(x_1, \dots, x_d) \end{cases}$$

Objectif : déterminer comment la **sortie** du **modèle** réagit aux variations de ses **entrées**.

Plusieurs types d'analyse :

- ▶ analyses qualitatives : est-ce qu'il y a des effets non-linéaires ? des interactions ?
ex. : méthodes de criblage (screening).
- ▶ analyses quantitatives : hiérarchisation des facteurs, tests statistiques H_0 "entrée négligeable".
ex. : indices de sensibilité de Sobol' (voir suite du cours).

Une analyse de sensibilité permettra éventuellement de mettre en défaut un modèle.

Plusieurs approches pour l'analyse de sensibilité quantitative :

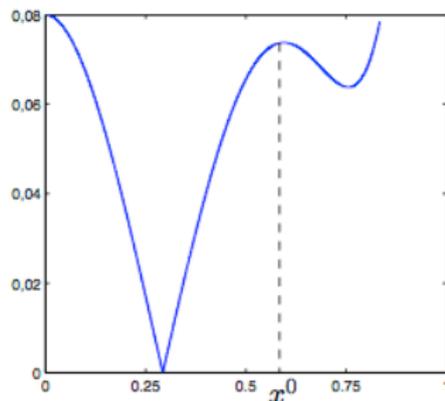
Approches locales :

$$\mathcal{M}(\mathbf{x}) \approx \mathcal{M}(\mathbf{x}^0) + \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}^0} (x_i - x_i^0) \text{ (développement de Taylor).}$$

Indice de sensibilité du premier ordre pour l'entrée i : $\left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}^0}$.

Avantages : moindre coût de calcul, même si d grand (lorsqu'on peut calculer l'adjoint, coût indépendant de la dimension).

Inconvénients : approche locale, qui de plus repose sur une hypothèse de linéarité



Approches globales :

On attribue au vecteur d'**entrées** une loi de probabilité définie à partir d'avis d'experts, d'observations, ...

ex. : si les entrées sont supposées indépendantes, il suffit de définir des lois marginales.

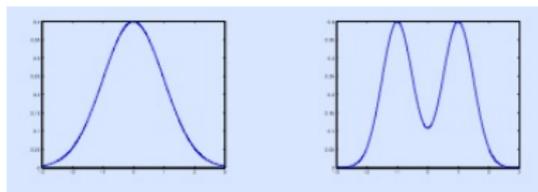


FIGURE : loi (gauche) unimodale, (droite) bimodale

On fait varier les entrées selon leur loi de probabilité.

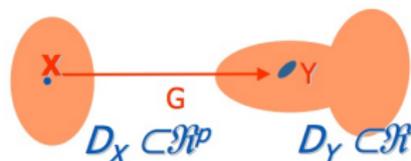


FIGURE : Locale versus Globale ($G := \mathcal{M}$), illustration.

On fait varier les **entrées** selon leur loi de probabilité.

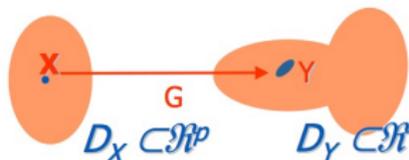


FIGURE : Locale versus Globale ($G := \mathcal{M}$), illustration.

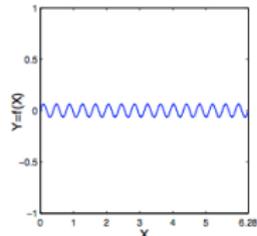
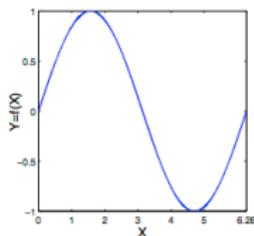
Les approches locales "globalisées" : par ex. (1) $\mathbb{E}_{\mathbf{X}} \left[\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{X}} \right]$, ou (2)

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X}} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{X}} \right)^2 \right].$$

Avantages : particulièrement intéressante si on dispose de l'adjoint (voir exposé Eric Blayo).

Inconvénients :

(1) n'est pas assez discrimin.



(2) est connu sous la terminologie **Derivative-based Global Sensitivity Measures**, voir Sobol' & Gresham (1995), Sobol' & Kucherenko (2009).

Cet indice est plus approprié pour du criblage que pour de la hiérarchisation (voir Lamboni *et al.*, 2013).

Ce cours est dédié aux approches globales permettant de hiérarchiser efficacement les facteurs d'entrée.

Mesures de sensibilité, définition, estimation

- I- Mesures fondées sur la régression linéaire.
- II- Analyse de la variance fonctionnelle.
- III- Estimation des indices de Sobol
 - par méthodes type Monte Carlo et variantes,
 - par méthodes spectrales.
- IV- Indices *distributionnels*.
- V- Extensions.

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$$

- ▶ Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- ▶ Coeff. de corrélation partielle

$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \hat{Y}^{-(i)}, X_i - \hat{X}_i^{-(i)}\right)$$

Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont indépendantes, $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;
- si les entrées sont corrélées, les PCC sont plus appropriés.

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$$

- ▶ Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- ▶ Coeff. de corrélation partielle

$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \widehat{Y}^{-(i)}, X_i - \widehat{X}_i^{-(i)}\right)$$

Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont **indépendantes**,
 $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;

- si les entrées sont **corrélées**, les PCC sont plus appropriés.

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$$

- ▶ Coeff. de corrélation linéaire

$$\rho_i = \rho(X_i, Y) = \frac{\text{Cov}(X_i, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X_i)}\sqrt{\text{Var}(Y)}}$$

- ▶ Coeff. de corrélation partielle

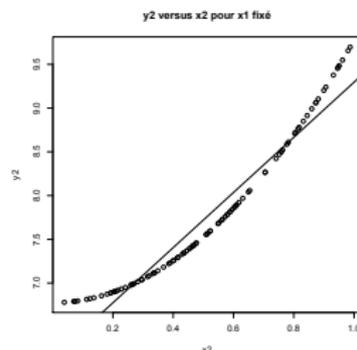
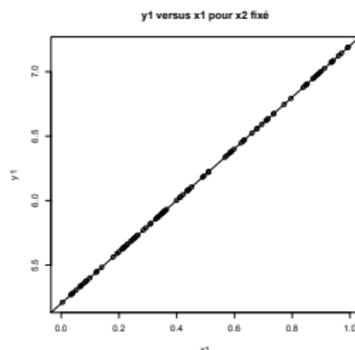
$$PCC_i = PCC(X_i, Y) = \rho\left(Y - \widehat{Y}^{-(i)}, X_i - \widehat{X}_i^{-(i)}\right)$$

Remarques :

- si $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, et si les entrées sont **indépendantes**,
 $\sum_{i=1}^d \rho^2(X_i, Y) = 1$;
- si les entrées sont **corrélées**, les PCC sont plus appropriés.

Validité du modèle linéaire ?

Un exemple jouet : $Y = 2X_1 + 3X_2^2 + 5$, $X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $i = 1, 2$,
 $X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$.



On peut approcher ce modèle par un modèle linéaire :

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_0 + \varepsilon, \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

Echantillon d'apprentissage : $y_k = \mathcal{M}(x_{1,k}, \dots, x_{d,k})$, $k = 1, \dots, 100$

$$\Rightarrow \hat{y} = \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_0 = 2.06x_1 + 3.15x_2 + 4.34.$$

Quelles mesures pour quantifier la qualité de ce modèle ?

★ Coefficient R^2

$$R^2 = \frac{SCE}{SCT} = \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k - \bar{y})^2}{\sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i x_{i,k}, \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k.$$

★ Erreur de prédiction, par exemple par validation croisée :

$$\frac{1}{m} \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k^{-(k)} - y_k)^2}{\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$\hat{y}_k^{-(k)} = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i^{-(k)} x_{i,k}$, $\hat{\beta}_i^{-(k)}$ estimé à partir de

$(y_j, \mathbf{x}_j), j = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, m.$

★ Coefficient R^2

$$R^2 = \frac{SCE}{SCT} = \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k - \bar{y})^2}{\sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i x_{i,k}, \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k.$$

★ Erreur de prédiction, par exemple par validation croisée :

$$\frac{1}{m} \frac{\sum_{k=1}^m (\hat{y}_k^{-(k)} - y_k)^2}{\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (y_k - \bar{y})^2},$$

$$\hat{y}_k^{-(k)} = \sum_{i=1}^d \hat{\beta}_i^{-(k)} x_{i,k}, \hat{\beta}_i^{-(k)} \text{ estimé à partir de}$$

$$(y_j, \mathbf{x}_j), j = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, m.$$

Si la relation **entrées/sortie** n'est plus linéaire mais monotone, on travaille sur les rangs.

$y_k, x_{i,k}, k = 1, \dots, m, i = 1, \dots, d$

$r_{i,k}$ rang de $x_{i,k}$ dans $(x_{i,1}, \dots, x_{i,m})$, r_k rang de y_k dans (y_1, \dots, y_m)

- $$\rho_i^S = \frac{\sum_{k=1}^m (r_{i,k} - \bar{r}_i)(r_k - \bar{r})}{\sqrt{\sum_{k=1}^m (r_{i,k} - \bar{r}_i)^2} \sqrt{\sum_{k=1}^m (r_k - \bar{r})^2}}$$

- idem pour pcc_i

Rappels d'ANOVA

Y quantité d'intérêt, X_1 (resp. X_2) facteur qualitatif à I (resp. J) niveaux.

modèle : $Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{i,j} + \varepsilon_{ij}$, ε_{ij} i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

contraintes d'identifiabilité : $\sum_{i=1}^I \alpha_i = 0$, $\sum_{j=1}^J \beta_j = 0$, $\sum_{i=1}^I \gamma_{ij} = 0$, $\sum_{j=1}^J \gamma_{ij} = 0$.

Estimation des effets :

plan complet, équilibré, avec $r > 1$ répétitions $\rightarrow y_{ijk}$, $k = 1, \dots, r$

$$\hat{\mu} = \bar{y}, \quad \hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i..} - \bar{y}, \quad \hat{\beta}_j = \bar{y}_{.j.} - \bar{y}, \quad \hat{\gamma}_{ij} = \bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y},$$

avec les notations usuelles $\bar{y} = \frac{1}{IJr} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r y_{ijk}$,

$$\bar{y}_{i..} = \frac{1}{Jr} \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{.j.} = \frac{1}{Ir} \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{ij.} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r y_{ijk}.$$

Dans le modèle précédent, on définit :

- les prévisions $\hat{y}_{ijk} = \bar{y}_{ij.}$,
- les résidus $\hat{\varepsilon}_{ijk} = y_{ijk} - \hat{y}_{ijk} = y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}$.

Décomposition de la variance :

$$\begin{aligned} SCT &= SCM &+ SCR \\ \text{variance totale} &= \text{variance expl. par le modèle} &+ \text{variance résiduelle} \end{aligned}$$

$$SCM = SCX_1 + SCX_2 + SCX_1 X_2 \quad \text{avec}$$

$$SCX_1 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{i..} - \bar{y})^2, \quad SCX_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{.j.} - \bar{y})^2,$$

$$SCX_1 X_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y})^2,$$

$$SCR = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - y_{ijk})^2.$$

Dans le modèle précédent, on définit :

- les prévisions $\hat{y}_{ijk} = \bar{y}_{ij.}$,
- les résidus $\hat{\varepsilon}_{ijk} = y_{ijk} - \hat{y}_{ijk} = y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}$.

Décomposition de la variance :

$$\begin{aligned}
 SCT &= SCM && + SCR \\
 \text{variance totale} &= \text{variance expl. par le modèle} && + \text{variance résiduelle}
 \end{aligned}$$

$$SCM = SCX_1 + SCX_2 + SCX_1 X_2 \quad \text{avec}$$

$$SCX_1 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{i..} - \bar{y})^2, \quad SCX_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{.j.} - \bar{y})^2,$$

$$SCX_1 X_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y})^2,$$

$$SCR = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^r (\bar{y}_{ij.} - y_{ijk})^2.$$

Tests d'hypothèse : plusieurs tests possibles.

ex. : H_0 : modèle additif contre H_1 : modèle complet

Statistique de test :

$$T = \frac{SCX_1 X_2 / (IJ - I - J + 1)}{SCR / (IJr - IJ)} \underset{H_0}{\sim} F(IJ - I - J + 1, IJr - IJ).$$

Hypothèses sous-jacentes au modèle d'ANOVA :

- les **facteurs** n'influencent que la moyenne de la variable quantitative Y et pas sa variance ;
- les variations autres que celles provoquées par les facteurs sont gaussiennes et indépendantes.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(\mathbf{s}, t) = \mathcal{M}(\mathbf{s}, t) + \varepsilon(\mathbf{s}, t), \quad (\mathbf{s}, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(\mathbf{s}, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(\mathbf{s}, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), \quad (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- i) les X_j sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(\mathbf{s}, t) = \mathcal{M}(\mathbf{s}, t) + \varepsilon(\mathbf{s}, t), \quad (\mathbf{s}, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(\mathbf{s}, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(\mathbf{s}, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), \quad (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- i) les X_j sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Généralisation fonctionnelle : (Antoniadis, 1984)

$$Y(\mathbf{s}, t) = \mathcal{M}(\mathbf{s}, t) + \varepsilon(\mathbf{s}, t), \quad (\mathbf{s}, t) \in S \times T$$

avec

- $\varepsilon(\mathbf{s}, t)$ processus gaussien centré de fonction de covariance $K(\mathbf{s}, t)$,
- S et T deux espaces métriques compacts.

Et dans un contexte plus général : (Hoeffding, 1948 ; Sobol', 1993)

$$Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d), \quad (X_1, \dots, X_d) \sim P_{X_1, \dots, X_d}.$$

Dans la suite on supposera :

- i) les X_i sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Dans la suite on supposera :

- i) les X_i sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

L'hypothèse ii) n'est pas restrictive : par la méthode d'inversion, $Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$ s'écrit

$$Y = \mathcal{M}(F_{X_1}^{-1}(U_1), \dots, F_{X_d}^{-1}(U_d)) = \widetilde{\mathcal{M}}(U_1, \dots, U_d)$$

avec $U_i, i = 1, \dots, d$ indépendantes, et pour tout $i, U_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $F_{X_i}^{-1}$ inverse généralisée de la fonction de répartition de X_i .

Le cas des entrées corrélées, beaucoup plus complexe, sera discuté à la fin de ce cours.

Dans la suite on supposera :

- i) les X_i sont indépendantes ;
- ii) $\forall i = 1, \dots, d, X_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

L'hypothèse ii) n'est pas restrictive : par la méthode d'inversion, $Y = \mathcal{M}(X_1, \dots, X_d)$ s'écrit

$$Y = \mathcal{M}(F_{X_1}^{-1}(U_1), \dots, F_{X_d}^{-1}(U_d)) = \widetilde{\mathcal{M}}(U_1, \dots, U_d)$$

avec $U_i, i = 1, \dots, d$ indépendantes, et pour tout $i, U_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$, $F_{X_i}^{-1}$ inverse généralisée de la fonction de répartition de X_i .

Le cas des entrées corrélées, beaucoup plus complexe, sera discuté à la fin de ce cours.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}[E(Y|X_i)] + E[\text{Var}(Y|X_i)].$$

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

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

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

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

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Vers les indices de sensibilité de Sobol' :

La sortie Y est-elle plus ou moins variable lorsqu'on fixe une des entrées ?

$\text{Var}(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i ? $\Rightarrow E[V(Y|X_i)]$

Plus cette quantité est petite, plus le fait de fixer X_i réduit la variance de Y : variable X_i influente.

Théorème (variance totale)

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

Définition (Indice de Sobol du premier ordre)

$i = 1, \dots, d$

$$0 \leq S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)} \leq 1$$

ex. : sortie linéaire $Y = \sum_{i=1}^d \beta_i X_i$, on obtient $S_i = \frac{\beta_i^2 \text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} = \rho_i^2$.

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$S_1 + S_2 = 1$, modèle additif

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$$S_1 + S_2 = 1, \text{ modèle additif}$$

Sur un cas d'école :

$$Y = X_1^2 + X_2 \quad X_i \sim \mathcal{U}([0, 1]) \quad X_1 \perp\!\!\!\perp X_2$$

$$\mathbb{E}(Y|X_1) = X_1^2 + \mathbb{E}(X_2) \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_1)] = \text{Var}(X_1^2) = \frac{4}{45}$$

$$\mathbb{E}(Y|X_2) = \mathbb{E}(X_1^2) + X_2 \Rightarrow \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_2)] = \text{Var}(X_2) = \frac{1}{12}$$

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(X_1^2) + \text{Var}(X_2) = \frac{31}{180}$$

$$S_1 = \frac{16}{31} \approx 0,516, \quad S_2 = \frac{15}{31} \approx 0,484$$

$S_1 + S_2 = 1$, modèle additif

Plus généralement,

Théorème (Décomposition de Hoeffding)

$$\mathcal{M} : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}, \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}^2(x) dx < \infty$$

\mathcal{M} admet une unique décomposition de la forme

$$\mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} \mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) + \dots + \mathcal{M}_{1,\dots,d}(x_1, \dots, x_d)$$

sous les contraintes

- ▶ \mathcal{M}_0 constante,
- ▶ $\forall 1 \leq s \leq d, \forall 1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq d, \forall 1 \leq p \leq s$

$$\int_0^1 \mathcal{M}_{i_1, \dots, i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_p} = 0$$

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

▶ $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$

▶ $i \neq j$

$\mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$

▶ ...

Calcul d'intégrales multiples.

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- ▶ $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- ▶ $i \neq j$
 $\mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \prod_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$
- ▶ ...

Calcul d'intégrales multiples.

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- ▶ $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \Pi_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- ▶ $i \neq j$
 $\mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \Pi_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$
- ▶ ...

Calcul d'intégrales multiples.

Conséquences : $\mathcal{M}_0 = \int_{[0,1]^d} \mathcal{M}(x) dx$ et les termes de la décomposition sont orthogonaux.

Le calcul des termes de la décomposition se ramène à :

- ▶ $\mathcal{M}_i(x_i) = \int_{[0,1]^{d-1}} \mathcal{M}(x) \Pi_{p \neq i} dx_p - \mathcal{M}_0$
- ▶ $i \neq j$
 $\mathcal{M}_{i,j}(x_i, x_j) = \int_{[0,1]^{d-2}} \mathcal{M}(x) \Pi_{p \neq i,j} dx_p - \mathcal{M}_0 - \mathcal{M}_i(x_i) - \mathcal{M}_j(x_j)$
- ▶ ...

Calcul d'intégrales multiples.

Décomposition de la variance : X_1, \dots, X_d i.i.d. $\sim \mathcal{U}([0, 1])$

$$Y = \mathcal{M}(X) = \mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(X_i) + \dots + \mathcal{M}_{1, \dots, d}(X_1, \dots, X_d)$$

- ▶ $\mathcal{M}_0 = \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ $\mathcal{M}_i(X_i) = \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ $i \neq j$ $\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j) = \mathbb{E}(Y|X_i, X_j) - \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y|X_j) + \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ ...

$$\text{Var}(Y) = \sum_{i=1}^d \text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i)) + \dots + \text{Var}(\mathcal{M}_{1, \dots, d}(X_1, \dots, X_d))$$

Décomposition de la variance : X_1, \dots, X_d i.i.d. $\sim \mathcal{U}([0, 1])$

$$Y = \mathcal{M}(X) = \mathcal{M}_0 + \sum_{i=1}^d \mathcal{M}_i(X_i) + \dots + \mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d)$$

- ▶ $\mathcal{M}_0 = \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ $\mathcal{M}_i(X_i) = \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ $i \neq j$ $\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j) = \mathbb{E}(Y|X_i, X_j) - \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y|X_j) + \mathbb{E}(Y)$,
- ▶ ...

$$\text{Var}(Y) = \sum_{i=1}^d \text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i)) + \dots + \text{Var}(\mathcal{M}_{1,\dots,d}(X_1, \dots, X_d))$$

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall i = 1, \dots, d \quad S_i = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)}$$

$$\forall i \neq j \quad S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i, X_j)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_j)]}{\text{Var}(Y)}$$

...

$$1 = \sum_{i=1}^d S_i + \sum_{i \neq j} S_{i,j} + \dots + S_{1,\dots,d}$$

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{u \subset \{1, \dots, d\}, u \neq \emptyset, i \in u} S_u$$

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall i = 1, \dots, d \quad S_i = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_i(X_i))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)]}{\text{Var}(Y)}$$

$$\forall i \neq j \quad S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathcal{M}_{i,j}(X_i, X_j))}{\text{Var}(Y)} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i, X_j)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_i)] - \text{Var}[\mathbb{E}(Y|X_j)]}{\text{Var}(Y)}$$

...

$$1 = \sum_{i=1}^d S_i + \sum_{i \neq j} S_{i,j} + \dots + S_{1, \dots, d}$$

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}, \mathbf{u} \neq \emptyset, i \in \mathbf{u}} S_{\mathbf{u}}$$

Indices de Sobol' :

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \dots, d \quad S_{T_i} = \sum_{\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}, \mathbf{u} \neq \emptyset, i \in \mathbf{u}} S_{\mathbf{u}} .$$

$$X_{(-i)} = (X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_d)$$

En utilisant le théorème de la variance totale,

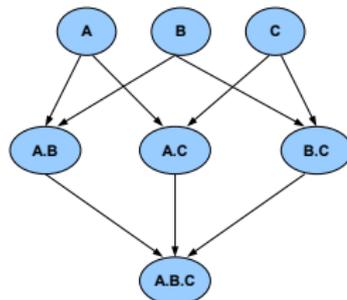
$$S_{T_i} = \frac{\mathbb{E} [\text{Var} (Y|X_{(-i)})]}{\text{Var}(Y)} = 1 - \frac{\text{Var} [\mathbb{E} (Y|X_{(-i)})]}{\text{Var}(Y)} .$$

Indices par facteur :

Effets
principaux

Interactions
2 facteurs

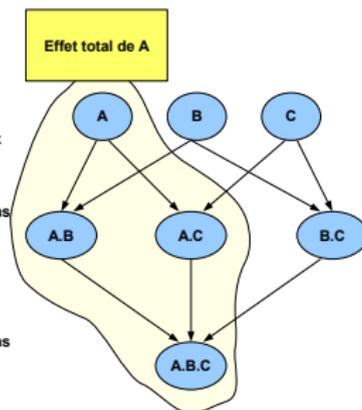
Interactions
3 facteurs



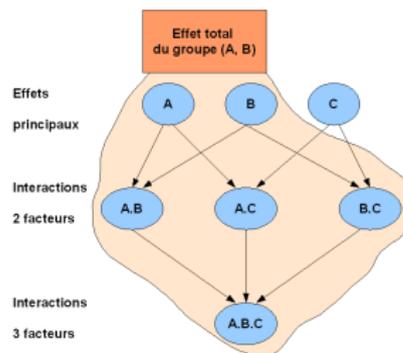
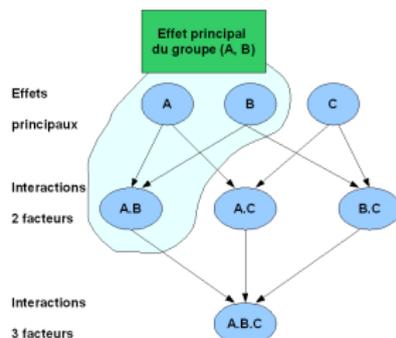
Effets
principaux

Interactions
2 facteurs

Interactions
3 facteurs



Indices par groupe de facteurs :



Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique, métamodélisation par processus gaussien (voir cours Amandine Marrel, Sébastien Da Veiga).

Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique, métamodélisation par processus gaussien (voir cours Amandine Marrel, Sébastien Da Veiga).

Constat : l'expression analytique des indices de Sobol', qui fait apparaître des intégrales sur des espaces de **grande dimension**, est rarement accessible.

2 types d'approches principalement pour l'estimation

- 1) approches type Monte-Carlo (hypothèse \mathbb{L}^2 sur le modèle) ;
- 2) approches spectrales (hypothèses de régularité supplémentaires).

Eventuellement si le modèle est trop coûteux à évaluer, on ajustera un métamodèle avant d'appliquer ces méthodes.

ex. : régressions paramétrique et non-paramétrique, métamodélisation par processus gaussien (voir cours Amandine Marrel, Sébastien Da Veiga).

Approches type Monte-Carlo : (Sobol' 93, Saltelli 02, Mauntz, ...)

Notations : $X'_{(-i)}$ copie indép. de $X_{(-i)}$, $Y = \mathcal{M}(X_i, X_{(-i)})$,
 $Y^i = \mathcal{M}(X_i, X'_{(-i)})$

Idée : comme $S_i = \frac{\text{Cov}(Y, Y^i)}{\text{Var}(Y)}$, l'idée est d'avoir une formule empirique.

Plans : 2 échantillonnages A et B (Monte-Carlo, LHS) indépendants.

$$A = \begin{pmatrix} X_{1,1}^A & \cdots & X_{d,1}^A \\ \vdots & & \vdots \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ X_{1,n}^A & \cdots & X_{d,n}^A \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} X_{1,1}^B & \cdots & X_{d,1}^B \\ \vdots & & \vdots \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ X_{1,n}^B & \cdots & X_{d,n}^B \end{pmatrix}$$

→ on crée d matrices d'échantillonnage C_i , $i = 1, \dots, d$:

$$C_i = \begin{pmatrix} X_{1,1}^A & \cdots & X_{i,1}^B & \cdots & X_{d,1}^A \\ \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ X_{1,n}^A & \cdots & X_{i,n}^B & \cdots & X_{d,n}^A \end{pmatrix}$$

On évalue $(1 + d) \times n$ le modèle \mathcal{M} :

$$y^A = \begin{pmatrix} y_1^A \\ \vdots \\ y_n^A \end{pmatrix} \quad y^B = \begin{pmatrix} y_1^B \\ \vdots \\ y_n^B \end{pmatrix} \quad \forall 1 \leq i \leq d \quad y^{C_i} = \begin{pmatrix} y_1^{C_i} \\ \vdots \\ y_n^{C_i} \end{pmatrix}$$

`sobolEff()` (Janon *et al.*, 2012 & 2013)

- $\hat{V}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k^B y_k^{C_i} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ numérateur indice d'ordre 1
- $\hat{V} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{(y_k^B)^2 + (y_k^{C_i})^2}{2} - \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{y_k^B + y_k^{C_i}}{2} \right)^2$ dénominateur
- $\hat{V} - \hat{V}_{(-i)}$ numérateur indice total

intervalles de confiance asymptotiques, estimateur asymptotiquement efficace

soboljansen()

- $\hat{V}_{(-i)} = \frac{1}{2n} \sum_{k=1}^n (y_k^B - y_k^{C_i})$ numérateur indice total

intervalles de confiance par bootstrap

Remarque :

On peut aussi remplacer les échantillonnages MC ou LHS par du QMC (hyp. de variations régulières).

La g -fonction de Sobol' :

$$f(x) = f_1(x_1) * f_2(x_2) \text{ avec } f_i(x_i) = \frac{|4x_i - 2| + a_i}{1 + a_i}, a_1 = 9, a_2 = 1$$

$$\rightarrow S_1 \approx 0.038, S_2 \approx 0.958$$

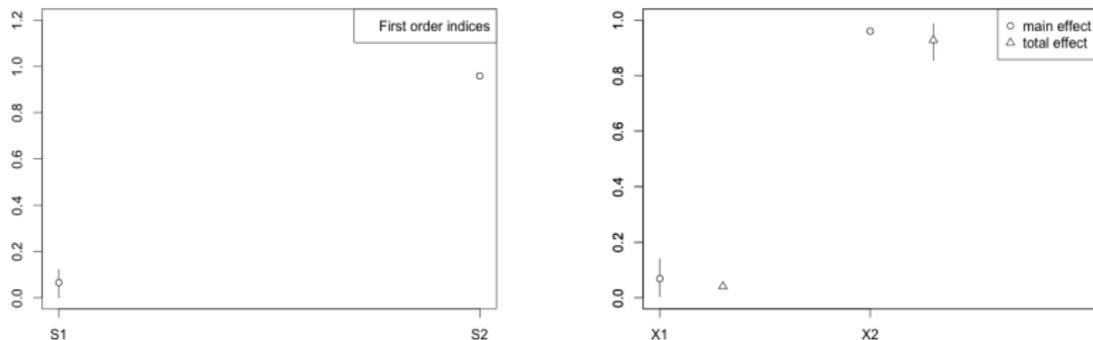
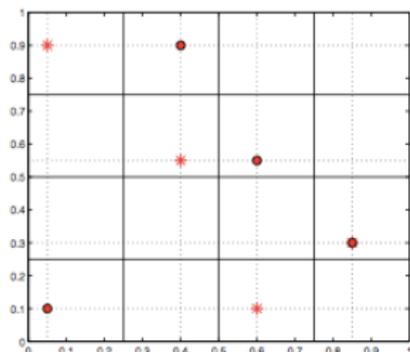


FIGURE : $n = 1000$, $b = 100$, IC(0.95), `sobolEff` (g.), `soboljansen` (d.)

Hypercubes latins répliqués : (Tissot *et al.*, 2015)

Hypercubes Latins répliqués :

 $k = 1, \dots, n$

$$\mathbf{x}_k = \left(\frac{\pi_1(k) - U_{1,\pi_1(k)}}{n}, \dots, \frac{\pi_d(k) - U_{d,\pi_d(k)}}{n} \right)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_k = \left(\frac{\tilde{\pi}_1(k) - U_{1,\tilde{\pi}_1(k)}}{n}, \dots, \frac{\tilde{\pi}_d(k) - U_{d,\tilde{\pi}_d(k)}}{n} \right)$$

On dispose de deux matrices B et \tilde{B} .

$$B = \begin{pmatrix} x_{1,1} & \dots & x_{d,1} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ x_{1,n} & \dots & x_{d,n} \end{pmatrix} \quad \tilde{B} = \begin{pmatrix} \tilde{x}_{1,1} & \dots & \tilde{x}_{d,1} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \tilde{x}_{1,n} & \dots & \tilde{x}_{d,n} \end{pmatrix}$$

→ 2n évaluations du modèle \mathcal{M} (n lignes de B + n lignes de \tilde{B}).

On permute les lignes de \tilde{B} de façon à ce que la colonne i de la matrice permutée \tilde{B}_i soit identique à la colonne i de B :

$$\tilde{x}_{k,i}^j = \tilde{x}_{\tilde{\pi}_i^{-1} \circ \pi_i(k),i} = x_{k,i}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Intervalle de confiance asymp., variance plus petite que pour MC.

Généralisation possible aux indices d'ordre 2 (via des tableaux orthogonaux de force 2), mais pas aux indices totaux.

Plans astucieux de Saltelli : Saltelli (2002) propose une combinaison astucieuse des plans pour estimer tous les indices d'ordre 1, d'ordre 2 et totaux avec un plan de taille $(2d + 2) \times n$.

	a	$c_{\{1\}}$	$c_{\{2\}}$	$c_{\{3\}}$	$c_{\{4\}}$	$c_{\{2,3,4\}}$	$c_{\{1,3,4\}}$	$c_{\{1,2,4\}}$	$c_{\{1,2,3\}}$	$c_{\{1,2,3,4\}}$
a	U_{-1}									
$c_{\{1\}}$	U_{-1}									
$c_{\{2\}}$	U_{-2}	U_{-12}								
$c_{\{3\}}$	U_{-3}	U_{-13}	U_{-23}							
$c_{\{4\}}$	U_{-4}	U_{-14}	U_{-24}	U_{-34}						
$c_{\{2,3,4\}}$	U_1		U_{12}	U_{13}	U_{14}					
$c_{\{1,3,4\}}$	U_2	U_{12}		U_{23}	U_{24}	U_{-12}				
$c_{\{1,2,4\}}$	U_3	U_{13}	U_{23}		U_{34}	U_{-13}	U_{-23}			
$c_{\{1,2,3\}}$	U_4	U_{14}	U_{24}	U_{34}		U_{-14}	U_{-24}	U_{-34}		
$c_{\{1,2,3,4\}}$		U_1	U_2	U_3	U_4	U_{-1}	U_{-2}	U_{-3}	U_{-4}	

FIGURE : Illustration en dimension $d = 4$.

$$U_{\mathbf{u}} = \mathbb{E}^2(Y|X_{\mathbf{u}}).$$

Et si on dispose déjà d'un plan ? (Plischke *et al.*, 2013)

On dispose de $(\mathbf{x}_k = (x_{k,i})_{i=1,\dots,d}, y_k = \mathcal{M}(\mathbf{x}_k))_{k=1,\dots,N}$

Pour estimer S_j , on partitionne les valeurs de $x_{k,j}$, $k = 1, \dots, N$ en M classes \mathcal{C}_m , $m = 1, \dots, M$. On note N_m le nombre de points par classe.

$$\hat{S}_j = \frac{\sum_{m=1}^M N_m (\bar{y}_m - \bar{y})^2}{\sum_{k=1}^N (y_k - \bar{y})^2} \quad (1)$$

avec

$$\bar{y}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{k: x_{k,j} \in \mathcal{C}_m} y_k$$

et

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N y_k .$$

Approches spectrales : (cas $d = 2$)

$$Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1,k_2) \in \mathbb{Z}^2} \alpha_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \phi_{1,k_1}(X_1) \phi_{2,k_2}(X_2)$$

avec, $\forall i = 1, 2, (\phi_{i,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\phi_{i,0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,0}(\mathcal{M}) \phi_{1,k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0,k_2}(\mathcal{M}) \phi_{2,k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1,k_2}(\mathcal{M}) \phi_{1,k_1}(X_1) \phi_{2,k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- ▶ $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1,k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1,k_2) \neq (0,0)} |c_{k_1,k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$)

$$Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2} \alpha_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2)$$

avec, $\forall i = 1, 2, (\Phi_{i, k})_{k \in \mathbb{Z}}$ b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i, 0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, 0}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2, k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, 0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- ▶ $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1, k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1, k_2) \neq (0, 0)} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$)

$$Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2} \alpha_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2)$$

avec, $\forall i = 1, 2, (\Phi_{i, k})_{k \in \mathbb{Z}}$ b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i, 0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, 0}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2, k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, 0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- ▶ $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1, k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1, k_2) \neq (0, 0)} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, base de Fourier.

Approches spectrales : (cas $d = 2$)

$$Y = \sum_{\mathbf{k}=(k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2} \alpha_{\mathbf{k}}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2)$$

avec, $\forall i = 1, 2, (\Phi_{i, k})_{k \in \mathbb{Z}}$ b.o.n. de $\mathbb{L}^2([0, 1])$ et $\Phi_{i, 0} \equiv 1$.

$$\mathcal{M}_0 = c_0(\mathcal{M}),$$

$$\mathcal{M}_1(X_1) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, 0}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1), \quad \mathcal{M}_2(X_2) = \sum_{k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{0, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{2, k_2}(X_2),$$

$$\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2) = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} c_{k_1, k_2}(\mathcal{M}) \Phi_{1, k_1}(X_1) \Phi_{2, k_2}(X_2).$$

On a alors par Parseval :

- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_1(X_1)) = \sigma_1^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, 0}(\mathcal{M})|^2$, (idem pour σ_2^2),
- ▶ $\text{Var}(\mathcal{M}_{1,2}(X_1, X_2)) = \sigma_{1,2}^2 = \sum_{k_1 \in \mathbb{Z}^*, k_2 \in \mathbb{Z}^*} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$,
- ▶ $\text{Var}(Y) = \sigma^2 = \sum_{(k_1, k_2) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, (k_1, k_2) \neq (0, 0)} |c_{k_1, k_2}(\mathcal{M})|^2$.

ex. : polynômes orthogonaux, bases d'ondelettes, **base de Fourier**.

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card}D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- ▶ $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- ▶ $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card}D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- ▶ $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- ▶ $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card}D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

- ▶ $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- ▶ $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

Procédure d'estimation :

Si D est un plan d'expérience sur $[0, 1]^2$, on propose la formule de **quadrature** :

$$\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D) = \frac{1}{\text{card}D} \sum_{\mathbf{x}=(x_1, x_2) \in D} \mathcal{M}(\mathbf{x}) e^{-2i\pi(k_1 x_1 + k_2 x_2)}.$$

On estime ensuite les parts de variance par **troncature** :

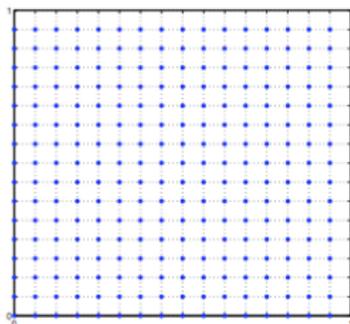
- ▶ $\hat{\sigma}_1^2(\mathcal{M}, K_1, D) = \sum_{k_1 \in K_1} |\hat{c}_{k_1, 0}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_1 \subset \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini, (idem pour $\hat{\sigma}_2^2$),
- ▶ $\hat{\sigma}_{1,2}^2(\mathcal{M}, K_{1,2}, D) = \sum_{(k_1, k_2) \in K_{1,2}} |\hat{c}_{k_1, k_2}(\mathcal{M}, D)|^2$, avec $K_{1,2} \subset \mathbb{Z}^* \times \mathbb{Z}^*$ de cardinal fini

On estime la variance totale par $\hat{\sigma}^2(\mathcal{M}, D) = \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}^2, D) - \hat{c}_{0,0}(\mathcal{M}, D)^2$.

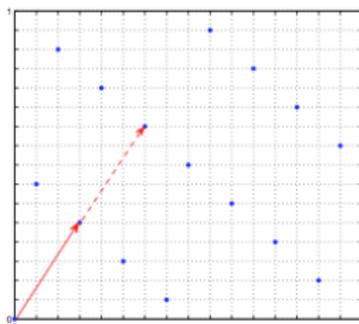
Les estimateurs des indices de Sobol' s'écrivent alors :

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i^2}{\hat{\sigma}^2}, \quad i = 1, 2, \quad S_{1,2} = \frac{\hat{\sigma}_{1,2}^2}{\hat{\sigma}^2}.$$

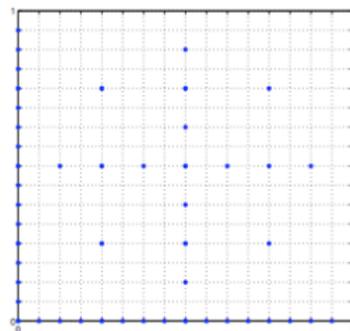
Quelques plans classiques :



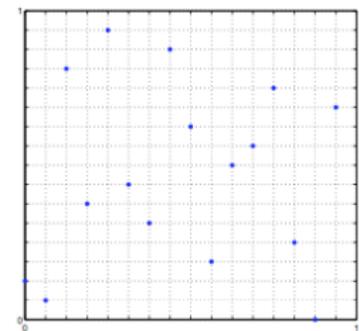
(a) grille régulière



(b) sous-groupe fini



(c) grille creuse



(d) tableau orthogonal

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Cukier *et al.*, 78) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature.

Remarques :

- ▶ pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- ▶ pour les indices totaux $f_{\text{ast}99}(\cdot)$ (pas de contrôle d'erreur) Saltelli *et al.*, 99.

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Cukier *et al.*, 78) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature.

Remarques :

- ▶ pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- ▶ pour les indices totaux $f_{\text{ast}99}(\cdot)$ (pas de contrôle d'erreur) Saltelli *et al.*, 99.

La qualité des estimateurs précédents est liée à la vitesse de décroissance du spectre de Fourier (donc à la régularité) de \mathcal{M} . Les méthodes FAST et RBD sont deux cas particuliers de cette approche (après régularisation du modèle).

FAST : (Cukier *et al.*, 78) *Fourier Amplitude Sensitivity Test*

- on fixe K_u un ensemble de fréquences a priori non négligeables ;
- on choisit D sous groupe cyclique (plan (b)) de façon à contrôler l'erreur de quadrature.

Remarques :

- ▶ pour \mathcal{M} suffisamment régulière, on peut obtenir des vitesses de convergence $\gg \sqrt{n}$;
- ▶ pour les indices totaux `fast99()` (pas de contrôle d'erreur) Saltelli *et al.*, 99.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$);
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques :

- ▶ ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- ▶ on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- ▶ si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$);
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques :

- ▶ ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- ▶ on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- ▶ si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

RBD : (Tarantola *et al.*, 06) *Random Balance Designs*

- on choisit D un tableau orthogonal de force 1 (plan (d)), brouillé par une permutation aléatoire ($D(\pi)$);
- K_u choix des fréquences a priori non négligeables.

Remarques :

- ▶ ces estimateurs sont réputés biaisés ;
- ▶ on peut corriger une partie du biais (Tissot *et al.*, 2012) ;
- ▶ si la fonction n'est pas assez régulière, le biais restant peut être important.

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Conclusions sur l'estimation :

L'approche spectrale qui semble être intéressante en terme de coût requiert plus d'hypothèses en terme de régularité.

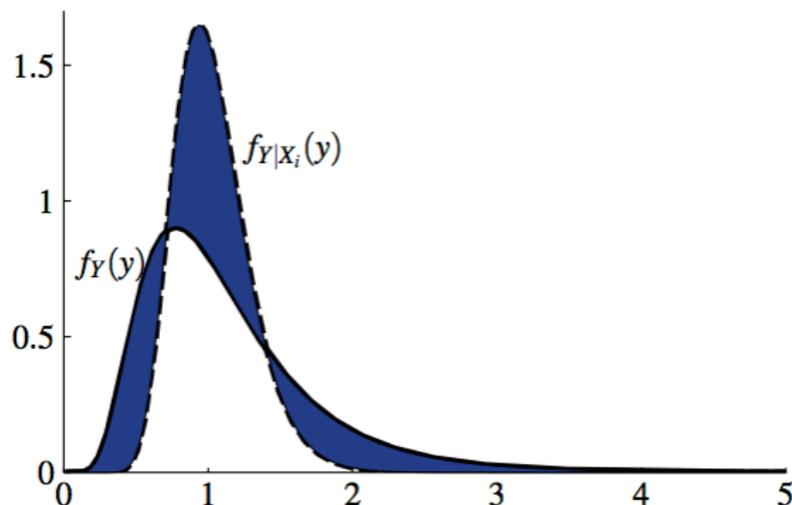
L'approche type Monte Carlo par hypercubes latins répliqués n'est pas trop coûteuse, et plus prudente pour des modèles irréguliers.

voir TP Analyse de Sensibilité

Borgonovo *et al.* ≥ 2007

$$\delta_i = \frac{1}{2} \mathbb{E}_{X_i} (S_i(X_i)) \text{ avec } S_i(X_i) = \int |f_Y(y) - f_{Y|X_i}(y)| dy.$$

Remarque : généralisable à $\mathbf{u} \subset \{1, \dots, d\}$



- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations . . .

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations ...

- ★ on peut construire des métamodèles lorsque le modèle initial est trop coûteux ;
- ★ entrées fonctionnelles : l'approche MC s'applique ;
- ★ sortie vectorielle : approche composante par composante, ou indices généralisés GSI (Lamboni *et al.*) ;
- ★ sortie fonctionnelle : on résume la sortie par un vecteur (projection sur une base adaptée) ou on fait un film (sortie temporelle) ou une carte (sortie spatiale) d'indices ;
- ★ entrées corrélées : il n'y a pas de décomposition univoque (l'équivalent de la décomposition de Hoeffding), difficile de séparer les effets dus aux interactions de ceux dus aux corrélations . . .

Quelques références I



A. Antoniadis.

Analysis of variance on function spaces.
Math. Oper. Forsch. und Statist., series Statistics, 15(1) :59–71, 1984.



E. Borgonovo.

A new uncertainty importance measure.
Reliability Engineering and System Safety, 92(6) :771–784, 2007.



R. I. Cukier, C. M. Fortuin, K. E. Shuler, A. G. Petschek, and J. H. Schaibly.

Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients : Theory.
Journal of Chemical Physics, 59 :3873–3878, 1973.



R. I. Cukier, H. B. Levine, and K. E. Shuler.

Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems.
Journal of Computational Physics, 26 :1–42, 1978.



R. I. Cukier, J. H. Schaibly, and K. E. Shuler.

Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients : Analysis of the approximations.
Journal of Chemical Physics, 63 :1140–1149, 1975.



F. Gamboa, A. Janon, T. Klein, A. Lagnoux, and C. Prieur.

Statistical inference for sobol pick freeze monte carlo method.
<http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00804668>, 2013+.



W. F. Hoeffding.

A class of statistics with asymptotically normal distributions.
Annals of Mathematical Statistics, 19 :293–325, 1948.



Bertrand looss.

Revue sur l'analyse de sensibilité globale de modèles numériques.
Journal de la Société Française de Statistique, 152(1) :3–25, 2011.



M. Lamboni, B. Iooss, A.-L. Popelin, and F. Gamboa.

Derivative-based global sensitivity measures : general links with Sobol' indices and numerical tests.
Mathematics and Computers in Simulation, 87 :45–54, 2013.



M. Lamboni, H. Monod, and D. Makowski.

Multivariate sensitivity analysis to measure global contribution of input factors in dynamic models.
Reliability Engineering and System Safety, 96(4) :450–459, 2011.



W. Mauntz.

Global sensitivity analysis of general nonlinear systems.
Master's Thesis, Imperial College. Supervisors : C. Pantelides and S. Kucherenko, 2002.



E. Plischke, E. Borgonovo, and C. L. Smith.

Global sensitivity measures from given data.
European Journal of Operational Research, 226 :536–550, 2013.



A. Saltelli.

Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices.
Computer Physics Communications, 145 :280–297, 2002.



A. Saltelli, K. Chan, and E. M. Scott.

Sensitivity Analysis.
John Wiley & Sons, 2000.



I. M. Sobol'.

Sensitivity analysis for nonlinear mathematical models.
Mathematical Modeling and Computational Experiment, 1 :407–414, 1993.



I. M. Sobol' and A. Gresham.

On an alternative global sensitivity estimators.
Proceedings of SAMO, Belgirate, pages 40–42, 1995.



I. M. Sobol' and S. Kucherenko.

Derivative based global sensitivity measures and the link with global sensitivity indices.
Mathematics and Computers in Simulation, 79 :3009–3017, 2009.



S. Tarantola, D. Gatelli, and T. A. Mara.

Random balance designs for the estimation of first-order global sensitivity indices.
Reliability Engineering and System Safety, 91 :717–727, 2006.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

Bias correction for the estimation of sensitivity indices based on random balance designs.
Reliability Engineering and System Safety, 107 :205–213, 2012.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

Variance-based sensitivity analysis using harmonic analysis.
<http://hal.archives-ouvertes.fr/docs/00/68/07/25/PDF>, 2012+.



J. Y. Tissot and C. Prieur.

A randomized orthogonal array-based procedure for the estimation of first- and second-order sobol' indices.
Journal of Statistical Computation and Simulation, 85 :1358–1381, 2015.