

MEXICO

Atelier MTK (Mexico tool kit)

<http://reseau-mexico.fr>

Hervé Monod, Juhui Wang

INRA - Mathématiques et Informatique Appliquées  
Unités MIA-Jouy-en-Josas

Journées du RNSC d'Evian, 14 au 18 octobre 2013



**MEXICO**  
WEXICO



Réseau National de Systèmes Complexes



- Réseau méthodologique du département MIA de l'INRA
- Soutien régulier du RNSC
- **Modélisation en environnement, agronomie, écologie**
- Centre d'intérêt : **méthodes d'exploration numérique** du modèle
- Composé d'environ 20 chercheurs
  - INRA, IRSTEA, IFREMER et Code Lutin, Université du Littoral (LIL), Cirad
  - **modélisateurs, informaticiens, statisticiens**
  - motivés par le développement d'outils partagés

- Intéresser les biologistes-modélisateurs au traitement statistique de leurs simulations et à une exploration raisonnée du comportement de leurs modèles
  - analyses de sensibilité
  - propagation d'incertitude
  - méta-modélisation

⇒ **écoles-chercheurs Mexico et Aspen, ouvrage Quae**

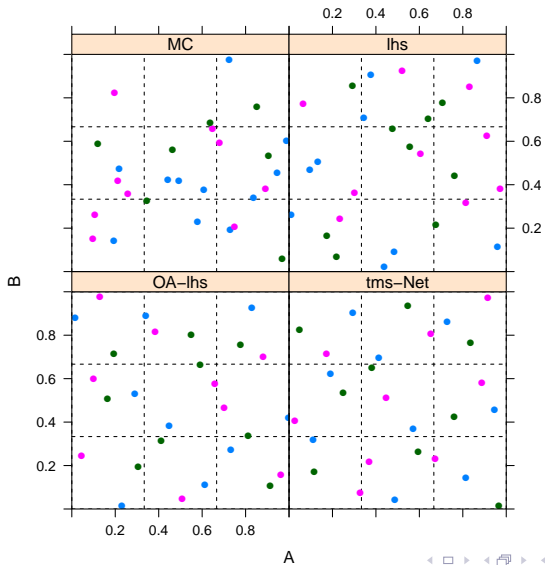
- Rendre ces méthodes accessibles au modélisateur
  - sous une forme homogène, générique et libre
  - par le biais de plates-formes de modélisation ou directement

⇒ **projet de BAO Mexico**

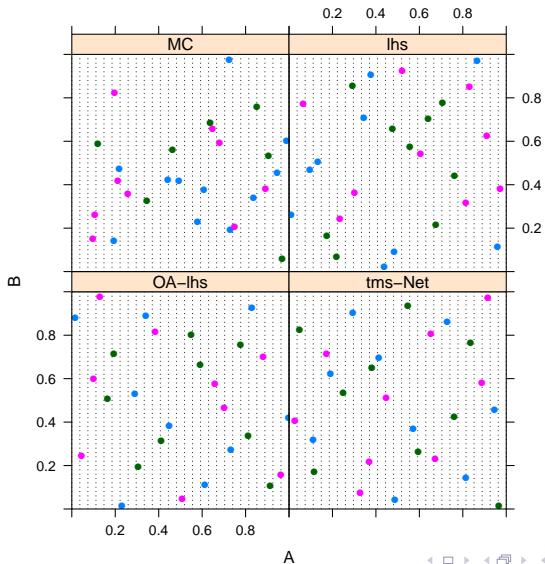
## Approche

- Définition formalisée d'une expérimentation numérique  
⇒ Formats standardisés d'échanges de données : **XML**, **classes R**
- Choix d'un environnement reconnu en statistique : **R**  
⇒ Packages existants : `SENSITIVITY`, `DICEDESIGN`, `RANDOMLHS`,  
...  
⇒ Nouveaux packages : `PLANOR`, `MULTISENSI`
- Procédures simples pour utiliser ces méthodes et en implémenter de nouvelles  
⇒ développement du package **R** `MTK`

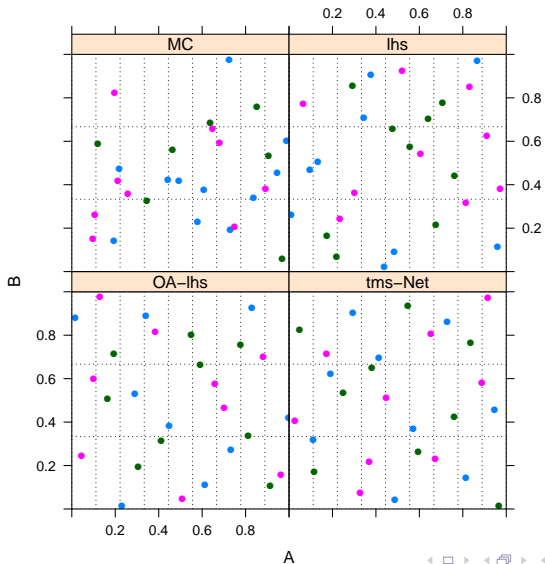
# Plans d'expérience



# Plans d'expérience



# Plans d'expérience



- 1 Package planor
- 2 Packages sensitivity, DiceXXX, etc.
- 3 Package mtk



# Plan

- 1 Package planor
- 2 Packages sensitivity, DiceXXX, etc.
- 3 Package mtk

# PLANOR

Caractéristiques :

- package R, déposé sur le CRAN en septembre
- construit des plans factoriels réguliers
- en particulier des plans factoriels **fractionnaires**
- pour expés réelles ou numériques
- (peut les randomiser)

# Plan factoriel fractionnaire

*Objectif* : analyse de sensibilité d'un modèle d'épidémiologie animale

(Courcoul, Monod *et al.*, 2011, J. Theor. Biol.)

Plan d'expérience numérique :

*facteurs = paramètres du modèle épidémio*

- 12 facteurs à 4 niveaux
- 7 facteurs à 2 niveaux
- Modèle : effets principaux + interactions entre 2 facteurs

$\implies 4^{12} \times 2^7 = 2^{31}$  combinaisons possibles

**Contrainte** :  $\leq 2^{12} = 4096$  simulations

# Sous R

Script :

```
> set.seed(123)
> frac.key <- planor.designkey(
  factors = LETTERS[1:19],
  nlevels = c(rep(4,12),rep(2,7)),
  model = ~(A+[...]+S)^2,
  nunits = 4096)
[...]
> frac.plan <- planor.design(frac.key)
```

Solution :

```
> frac.plan@design
      A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S
1     1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
2     1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 1 1 1 1 1 1
.     .
.     .
.     .
4096 4 4 4 4 1 4 2 2 2 2 4 3 2 1 1 2 1 1 1
>
```

*Propriété* : Plan complet pour tous les sous-ensembles de 4 facteurs  
 ⇒ **Tableau orthogonal** de force 4 ( $\equiv$  résolution 5)

## Matrice clé sur un cas simple

4 facteurs à 2 modalités  $\Rightarrow$  sélectionner 8 traitements parmi  $2^4 = 16$

<i>Unit</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D = ABC</i>
000	0	0	0	0
001	0	0	1	1
010	0	1	0	1
011	0	1	1	0
100	1	0	0	1
101	1	0	1	0
110	1	1	0	0
111	1	1	1	1

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

## Conséquences : aliasing

$$1 = ABCD$$

$$A = BCD$$

$$B = ACD$$

$$C = ABD$$

$$D = ABC$$

$$AB = CD$$

$$AC = BD$$

$$AD = BC$$

interactions d'ordre  $\geq 3$  nulles  $\Rightarrow$  effets principaux estimables

# Plan

- 1 Package planor
- 2 Packages sensitivity, DiceXXX, etc.
- 3 Package mtk



# Packages sensitivity, DiceXXX, etc.

## Package sensitivity

- méthodes classiques d'exploration numérique
- Morris, FAST, Sobol (avec bootstrap)
- ...

## Packages Dice

- DiceDesign
- DiceEval
- ...

+ lhs, QuasiRandom, etc.

cf. site Mexico, site du GDR MascotNum

# Plan

- 1 Package planor
- 2 Packages sensitivity, DiceXXX, etc.
- 3 Package mtk**

# Package mtk

## Caractéristiques

- package R en développement
- vision formalisée de la conception, réalisation, analyse d'une expérience numérique
- 2 utilisations visées
  - directement sous R
  - à partir d'une plateforme de modélisation  $\Rightarrow$  formats XML
- flexibilité pour intégrer/ajouter des méthodes

# Exemple

## 1. Déclaration des facteurs d'entrée et de leurs distributions

```
x1 <- make.mtkFactor(name="x1", distribName="unif",
  distribPara=list(min=-pi, max=pi))
x2 <- make.mtkFactor(name="x2", distribName="unif",
  distribPara=list(min=-pi, max=pi))
x3 <- make.mtkFactor(name="x3", distribName="unif",
  distribPara=list(min=-pi, max=pi))
factors <- mtkExpFactors(list(x1,x2,x3))
```

## 2. Déclaration de la méthode d'échantillonnage

```
exp1.sampler <- mtkNativeSampler(service="Morris",
  information=list(size=20))
```

### 3. Déclaration du simulateur

```
exp1.simulator <- mtkNativeSimulator(service="Ishigami")
```

### 4. Déclaration de la méthode d'analyse

```
exp1.analysor <- mtkNativeAnalysor(service="Morris",  
  information=list(nboot=20))
```

### 5. Formation du workflow

```
exp1 <- mtkExpWorkflow(expFactors=factors,  
  processesVector = c(design=exp1.sampler,  
    evaluation=exp1.simulator,  
    analysis=exp1.analysor))
```

# Principe du Add-On

```
mtk.samplerAddons(where="BMCSampler.R", authors="H. Monod,  
INRA-MIA-Jouy, 78352, Jouy en Josas, France",  
name="MonteCarlo", main="basicMC",  
plot="plot.basicMC")
```

# mtk : schéma général

