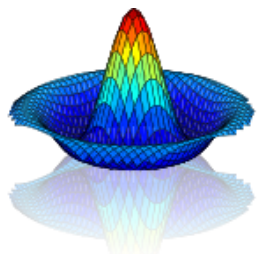
# Echantillonnage : Monte Carlo et hypercube latin

## École Chercheur Mexico

Thierry Faure

Cemagref — LISC, Aubière, France

Gien, le 9 Juin 2010



MEXICO

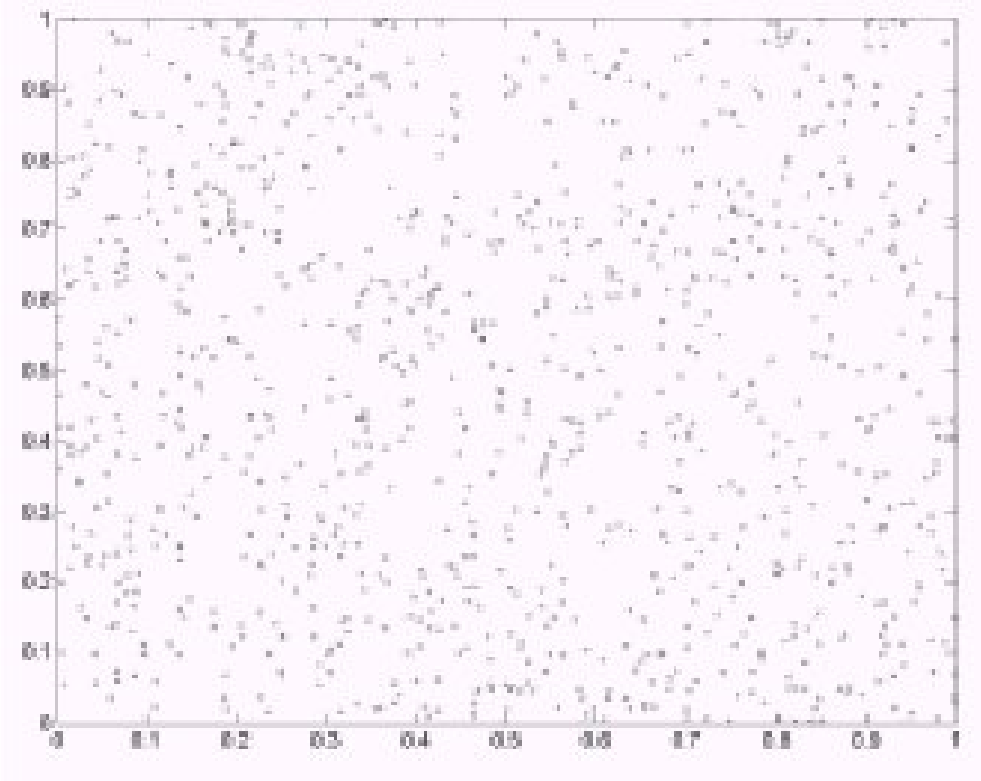
# Plan

# Plan

# Exemple d'échantillonnage

tirage selon une loi uniforme de n points indépendants de $\Omega$

```
plot(runif(1000),runif(1000))
```



# Plan

# Indices basés sur la régression

Méthodes statistiques reliées à la régression (Venables and Ripley, 1999)
Coefficients de Corrélation utilisés pour mesurer les relations entre les entrées et les sorties du modèle.

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{p} \beta_i X_i \text{ et } V(Y) = \sum_{i=1}^{p} \beta_i^2 V(X_i)$$

- Standardized regression coefficients (SRC) : $SRC_i = \frac{\beta_i^2 V(X_i)}{V(Y)}$
- Coefficient PCC : partial correlation coefficient : $PCC_i = \frac{Cov(Y, X_i | X_{\sim i})}{\sqrt{V(Y|X_{\sim i}) V(X_i|X_{\sim i})}}$ : Il permet d'évaluer la sensibilité de $Y$ à $X_i$ en éliminant l'effet des autres variables, toujours donc sous l'hypothèse de linéarité du modèle

# Conclusion

- Le modèle de régression peut être étendus pour prendre en compte les intéractions . En particulier lorsque le coefficient de determinaison est faible.
- Les méthodes de régression sont efficaces pour prendre en compte les effets linéaires. D'autres méthodes sont à considérer pour capturer les non linéarité.

# Utilisation

library(sensitivity) pcc(X, y, rank = FALSE, nboot = 0, conf = 0.95)
src(X, y, rank = FALSE, nboot = 0, conf = 0.95)
plot(x, ylim = c(-1,1), ...)

# Objectifs et enjeux

Lorsque l'objectif est de modéliser le code en phase exploratoire (quand aucune simulation n'a encore été réalisée), on recherche souvent à satisfaire les deux contraintes suivantes :

- D'une part, répartir les points dans l'espace le plus possible de façon à capter les non-linéarités.
- D'autre part, faire en sorte que ce remplissage de l'espace subsiste par réduction de la dimension.

On cherche à réaliser des expérimentations en remplissant l'espace des paramètres "au mieux"

- Comment définir ce "au mieux" ?
- Minimum de points, représentativité

La qualité de la répartition spatiale est mesurée soit à l'aide de critères déterministes comme les distances minimax ou maximin (Johnson et al., 1990), soit à l'aide de critères probabilistes comme la discrépance

# Plan

# DIFFÉRENTS TYPES DE CRITÈRES

- Critères associés aux distances entre les points de l'ensemble de données $x(n) = x1, ..., xn$ (ex : critères faisant intervenir une « moyenne », une variabilité, une comparaison entre min et max des espacements),
  $\Rightarrow$ Critères de régularité des espacements.
- Critères associés aux distances entre les points de $x(n) = x1, ..., xn$ et des points de l'espace X (ex : critère minimax),
  $\Rightarrow$ Critères de « remplissage » de l'espace.
- Critères associés à une comparaison entre nombre de points contenus dans des pavés et volume de ces pavés ex : les critères de discrépance
  $\Rightarrow$ Critères de « remplissage » de l'espace.

Nous supposerons que $X = [0, 1]^d$ .

# Maximin et Minimax

Utilisation des critères minimax ou maximin (Johnson et al., 1990) pour disperser les points au mieux.

## Maximin

Distance minimum : C'est la plus petite distance entre deux points de l'échantillon : $min_{i \neq j} d(x_i, x_j)$, avec d la distance euclidienne $d(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{l=1}^{k} (x_{il} - x_{jl})^2}$

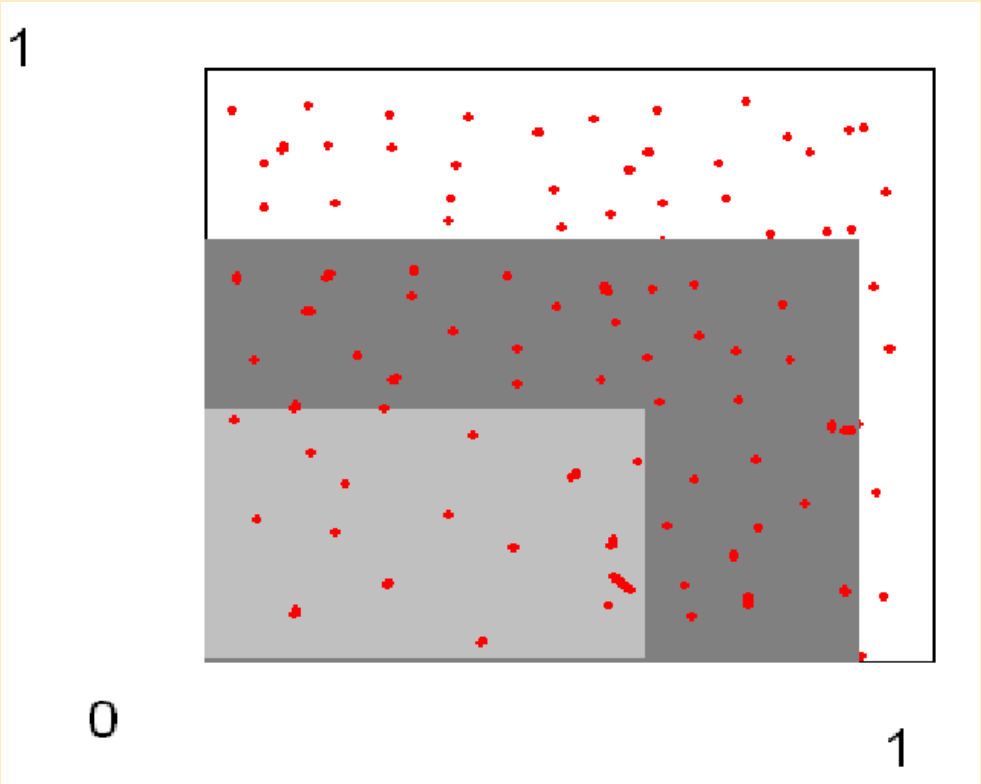
Plan maximin : Un plan maximin est un plan qui maximise la distance minimale entre deux points de l'échantillon.

## Minimax

Critère de distance maximum :C'est la plus grande distance entre un point du domaine d'étude et un point de l'échantillon. Plan minimax : Un plan minimax est un plan qui minimise la distance maximale entre un point du domaine et un point de l'échantillon.

# Discrépance

Discrépance : $D^*(X) = \sup_{P \in I^{s*}} \left| \frac{\#(P,(x(n)))}{n} - \lambda(P) \right|$ Mesure l'écart maximal de la distribution des points de la suite à la répartition uniforme.



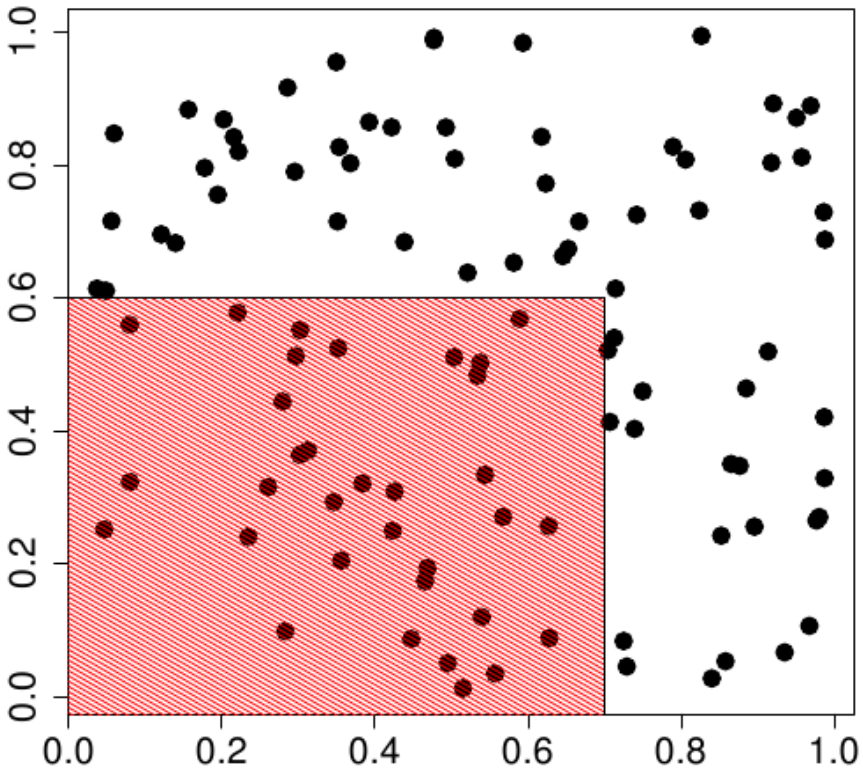

L'inégalité de Koksma-Hlawka montre que la discrépance intervient dans l'erreur de calcul d'une intégrale pour des fonctions à variation bornée.

# Discrépance

Interprétation géométrique de la discrépance généralisée

- Comparaison entre le nombre de points de la suite x(n) compris dans un pavé de X, et le volume de ce pavé.

**Discrépance modifiée** ; (en rouge, pavé ancré à l'origine)

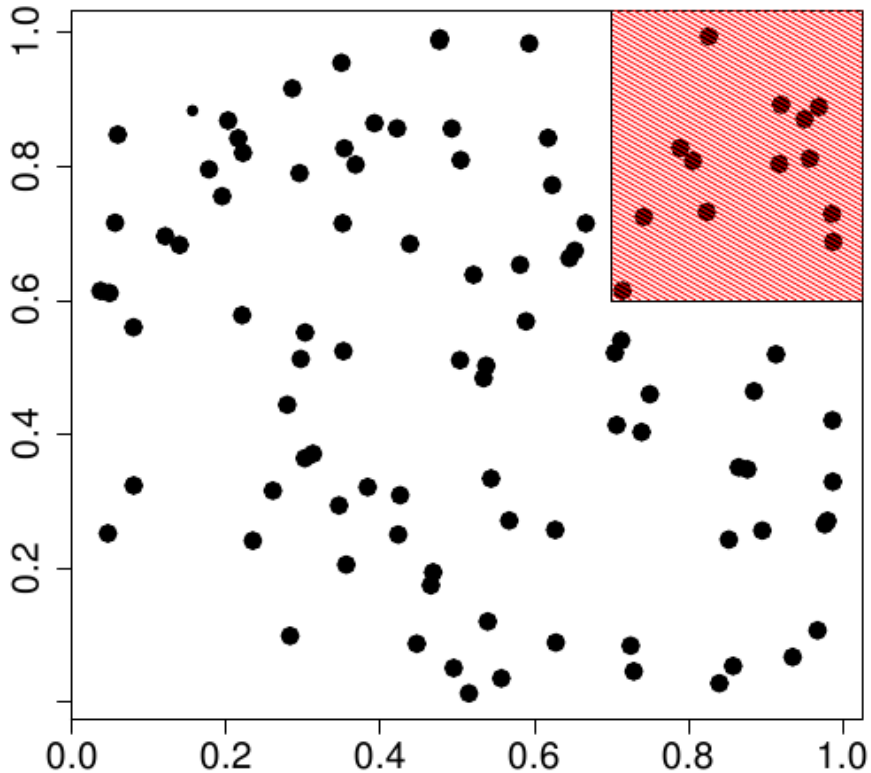


# Discrépance

Interprétation géométrique de la discrépance généralisée

- Comparaison entre le nombre de points de la suite x(n) compris dans un pavé de X, et le volume de ce pavé.

**Discrépance « centrée »** ;
(en rouge, pavé dont une extrémité est le sommet de X le plus proche du point x = (0.7, 0.6))

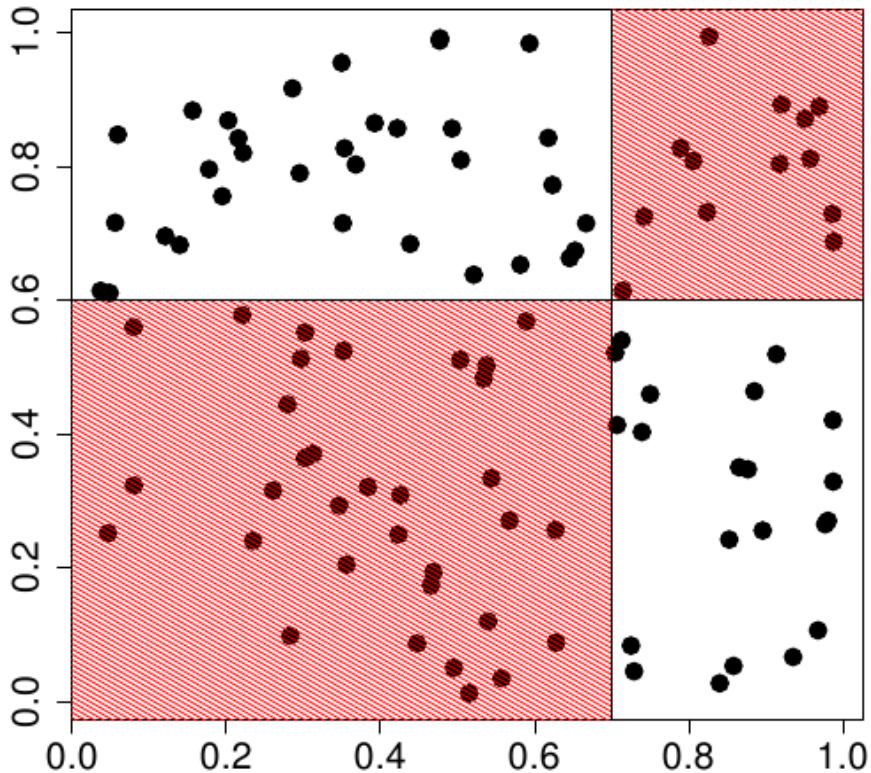


# Discrépance

Interprétation géométrique de la discrépance généralisée

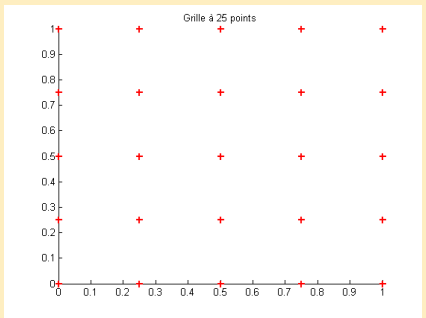
- Comparaison entre le nombre de points de la suite x(n) compris dans un pavé de X, et le volume de ce pavé.

**Discrépance «symétrique»** ; (en rouge, pavé «symétrique» : union des 2 pavés rouges, dont les extrémités sont des sommets «pairs», i.e. la somme de leurs composantes est paire)

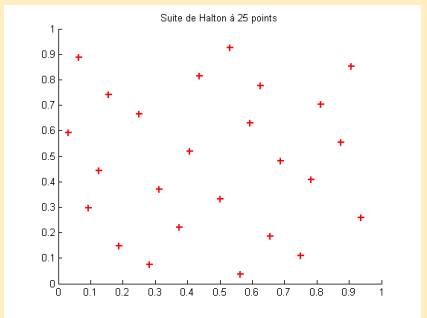


# Dispersion

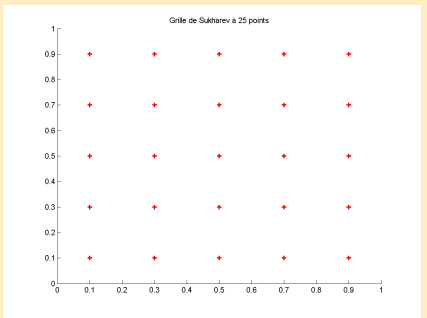
**Dispersion :** $\delta(x_n) = \max_{y \in I^s} \min_{i=1,\ldots,n} d(y, x_i)$




Regular Grid
(25 points)




Halton sequence
(25 points)




Sukharev grid
(25 points)

Pour les discrépances :

| Grille réguliére (avec n points) | Sequence à faible discrepance |
|---|---|
| $O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$ | $O\left(\frac{log^d(n)}{n}\right)$ |

# Plan

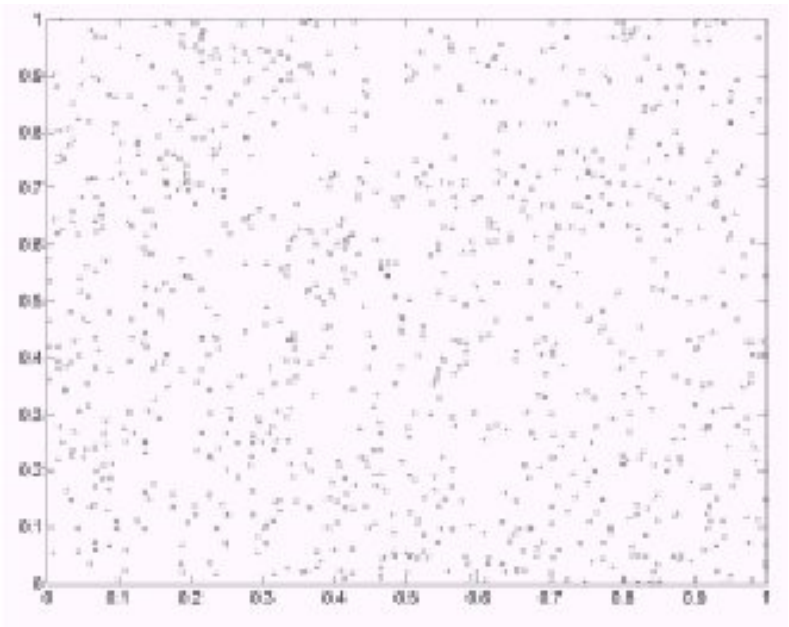
# méthode de Monte carlo

Le plan classique dans les méthodes de monte-carlo consiste à générer des suites de points pseudo-aléatoires dans l'espace des facteurs.
L'erreur d'estimation découle du théorème central limite. Elle est en $1/\sqrt{n}$, n étant la taille de l'échantillon.
On distingue :

- nombres pseudo-aléatoires
- nombres quasi-aléatoires

# nombres pseudo-aléatoires

- tirage selon une loi uniforme de n points indépendants de $\Omega$
- erreur probable d'estimation en $O(\sqrt{(n)})$
- la vitesse de convergence ne dépend pas de la dimension d de $\Omega$



# Nombres quasi-aléatoires

- Utilisation de suite à faible discrépance
- exemples : Niederreiter, Halton, Sobol

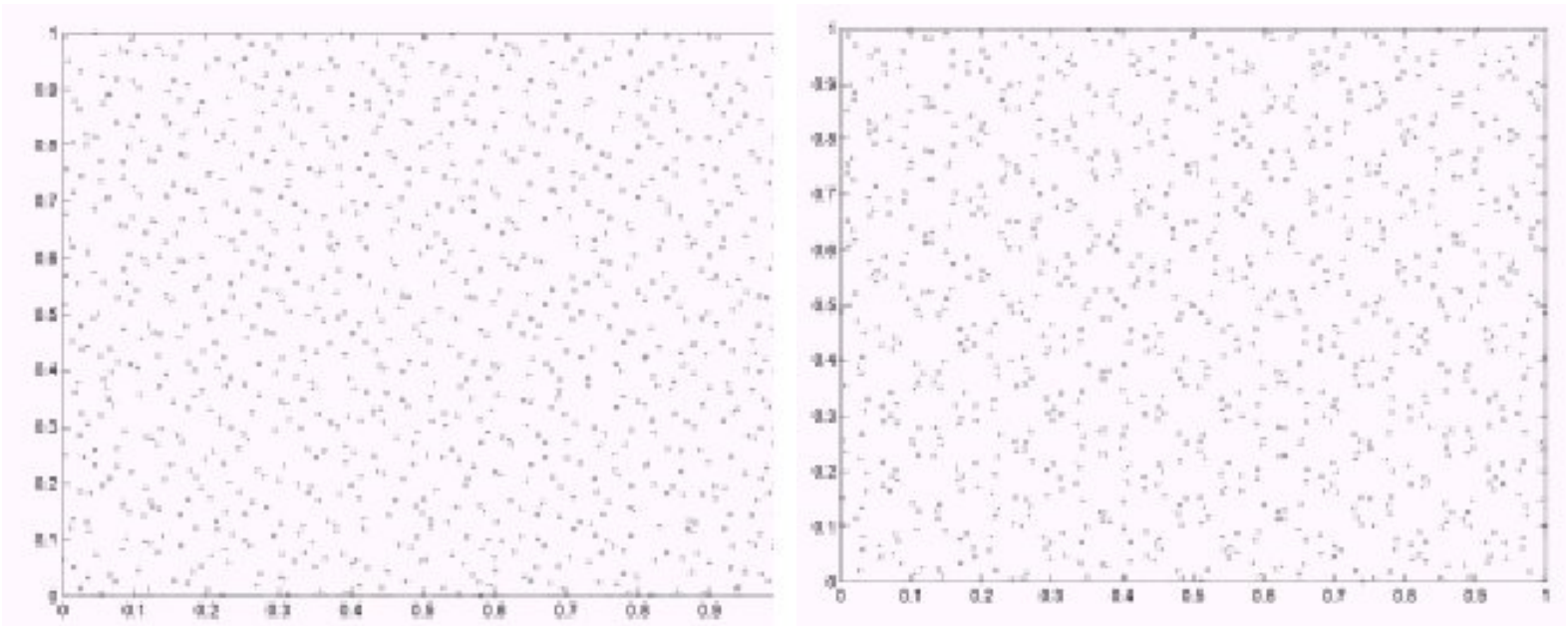


FIGURE: Niederreiter et Sobol

```
 library(randtoolbox
halton(1000,2)
sobol(1000, scramb = 3)
```

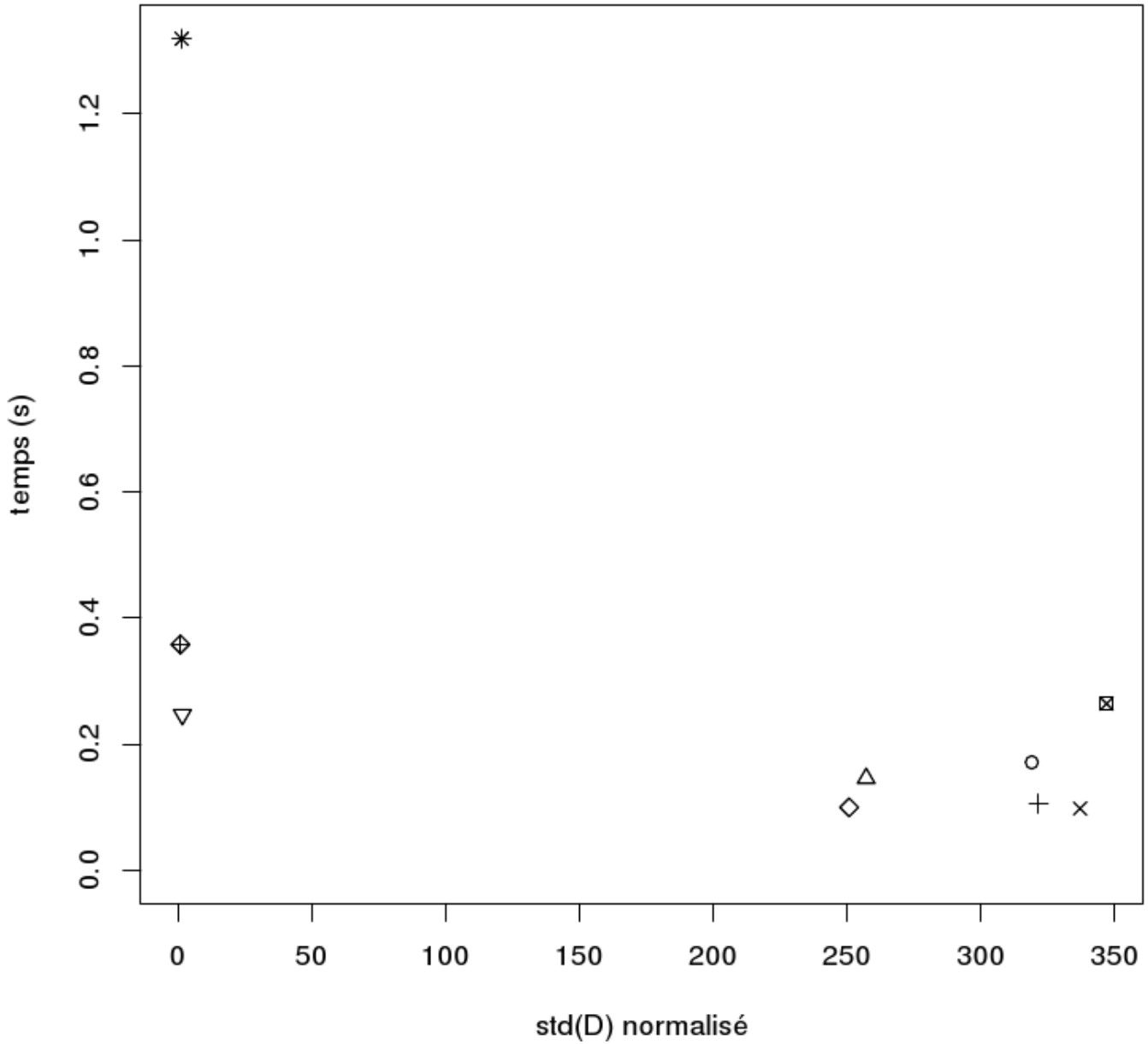



FIGURE: Comparaison des méthodes d'échantillonnages

# Plan

# Hypercube latin

Méthode la plus populaire des méthodes de remplissage de l'espace
Définition :Un plan hypercube latin (LHD) avec n runs et K facteurs d'entrées (noté LHD(n,K) est une matrice $n \times K$, dans laquelle chaque colonne est une permunation aléatoire de $\{ 1, 2, \cdots, K \}$.
Propriétés :

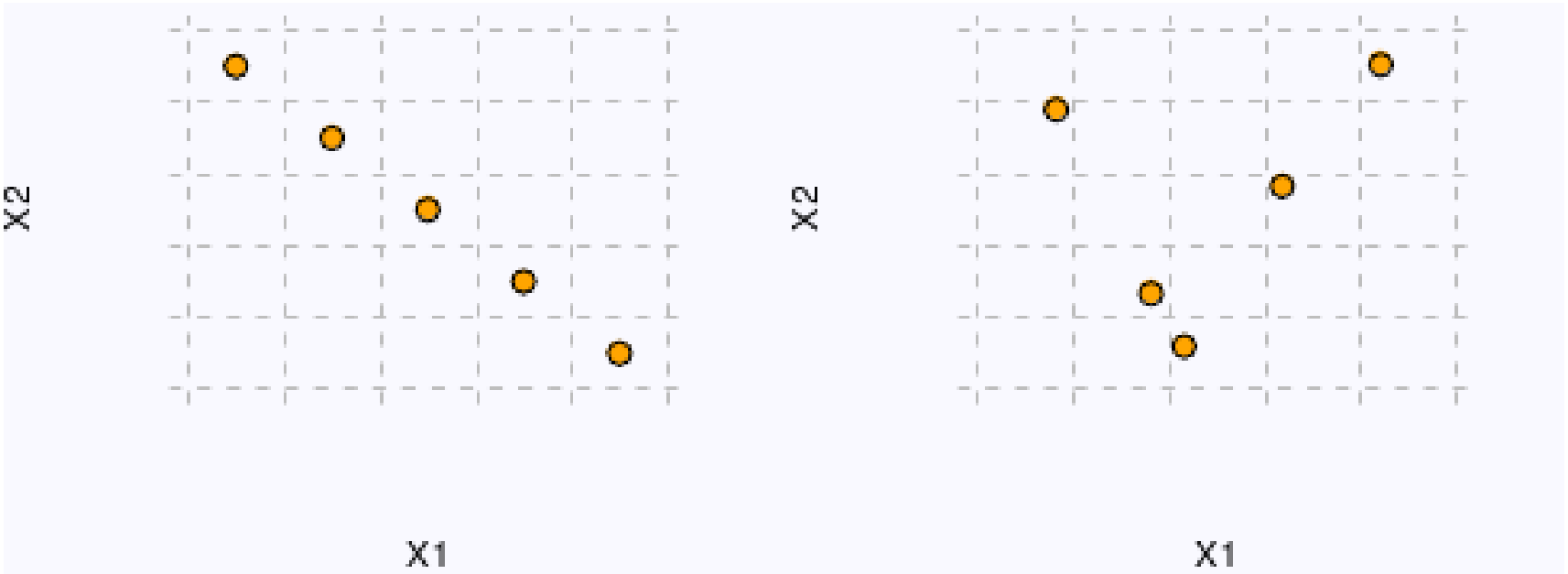
- 

# Quelques méthodes de construction

- Méthode standard : distribution
- Méthode de construction : Algorithm LHSA
- Itérative
- maximin L

# Méthode standard

- Chaque dimension de $\Omega$ est découpée en L classes de même amplitude, découpage de $\Omega$ en $L^d$ strates,
- Tirages de L strates telles que toutes les classes du découpage des facteurs soient présentes une fois et une seule,
- Tirage d'un point dans chacune des L strates.
- Répétition du processus.



# Bibliographie


- G. E.P. Box, et al., 2005, Statistics for experimenters, 2nd edition, Wiley.
- B. Gandar, G. Loosli, and G. Deffuant. Sample dispersion has a greater impact on classification error than sample discrepancy. submitted to JMLR.
- B. Gandar, Loosli, G., Deffuant, G., (2010) 'How to generate the best samples for learning in classification ?', AISTATS Conference
- B. Husslage et al., 2008, Space-filling Latin hypercube designs for computer experiments, SSRN-id895464 Report No. 2008–104
- M. E. Johnson et al., 1990, Moore L.M., Ylvisaker D. Minimax and maximin distance designs. J. of Statis. Planning and Inference, 26, 131-148.
- A. Saltelli, K. Chan and E. M. Scott eds, 2000, Sensitivity Analysis, Wiley.
- A. Saltelli et al. 2008, Global sensitivity analysis - The primer, Wiley.
- Thomas J.Santner, et al., 2003, The design and analysis of computer experiments, Springer.
- Venables, W.N., Ripley, B.D., 1999. Modern Applied Statistics with S-PLUS. Springer, Berlin.