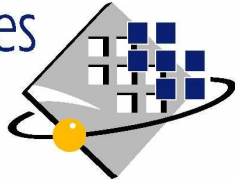


Faculté des  
sciences  
d'Orsay



**UNIVERSITÉ  
PARIS-SUD 11**

## THÈSE DE DOCTORAT

SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE

*École Doctorale « Sciences et Technologies de l'Information des  
Télécommunications et des Systèmes »*

Présentée par : **Morgan ROGER**

Sujet :

### CONTRIBUTIONS À LA PLANIFICATION D'EXPÉRIENCES ROBUSTE À L'ERREUR STRUCTURELLE

Soutenue le 26 novembre 2007 devant les membres du jury :

M. Guy DEMOMENT (président)

M. Luc PRONZATO (rapporteur)

Herr Friedrich PUKELSHEIM (rapporteur)

M. Jean-Marc MARTINEZ (examineur)

M. Gilles FLEURY (directeur de thèse)

M. Laurent LE BRUSQUET (encadrant)



*À Zoé, Nina et Maëlle*



# Remerciements

Je tiens à témoigner ici toute ma gratitude à M. Guy DEMOMENT de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, avec sa prestance habituelle. Il a toujours été pour moi un pédagogue remarquable, dont les enseignements m'ont incité à continuer dans le domaine du traitement du signal.

J'ai également été honoré que MM. Luc PRONZATO et Friedrich PUKELSHEIM acceptent de rapporter sur cette thèse et je leur exprime ma profonde reconnaissance pour le temps qu'ils ont consacré à la tâche en dépit d'un emploi du temps que j'imagine chargé. Leurs remarques pertinentes et leurs conseils avisés m'ont permis de parachever ce document.

Je tiens à remercier M. Jean-Marc MARTINEZ de l'intérêt qu'il a porté à mes travaux et de sa présence dans le jury. J'espère que nos discussions futures pourront mener à des collaborations fructueuses.

J'adresse mes remerciements à mon directeur de thèse, M. Gilles FLEURY, pour m'avoir offert la possibilité de travailler sous sa direction.

Je souhaite également rendre honneur à M. Laurent LE BRUSQUET qui a suivi de près ma progression pendant ces années de thèse. Je le remercie chaleureusement pour son aide et son soutien permanents, même dans les moments difficiles. J'ai pris beaucoup de plaisir à travailler avec lui et j'espère que notre collaboration continuera à l'avenir.

Je ne saurais oublier de remercier tous les membres du Département Signaux et Systèmes Électroniques, passés ou présents, pour l'accueil chaleureux qu'ils m'ont offert et pour avoir rendu possible le bon déroulement de cette thèse. Un grand merci en particulier à Alexia, Arnaud, Jérôme, José, Julien, Julien, Mohammad, Sylvain et Sylvie pour les moments de détente partagés.

Ces remerciements ne seraient pas complet sans une pensée pour les autres personnes qui me sont chères, même loin de mes yeux. J'adresse ici un merci tout particulier pour leur soutien inconditionnel et leur indulgence à mes parents, ma sœur et toute ma famille, à mes frères de cœur à Valenciennes, à mes amis de LLG, et aux autres, dont la liste serait trop longue à établir mais qui se reconnaîtront sans mal.



**Résumé.** Nous traitons le problème de planification d'expériences robuste à l'erreur structurelle pour la régression, lorsque la structure de régression est paramétrique et linéaire par rapport aux paramètres. L'erreur structurelle est modélisée par un processus stochastique, gaussien ou plus généralement qui possède un moment d'ordre deux. On considère principalement le cas de l'estimation des paramètres par moindres carrés avec comme critère de performance du prédicteur l'intégrale de l'erreur quadratique de prédiction (IEQP), mais la démarche reste valable pour les moindres carrés pondérés et pour toute fonctionnelle linéaire de l'erreur de prédiction. Les critères d'optimalité retenus sont fondés sur l'espérance totale (par rapport à la loi conjointe du bruit et l'erreur structurelle) de l'IEQP et le quantile de l'IEQP, qu'on optimise pour les protocoles exacts à l'aide d'une méthode par essaim de particules. L'optimisation du quantile a nécessité de développer une méthode numérique efficace pour l'approximation du quantile d'une somme de carrés de variables gaussiennes centrées corrélées. Le problème de la dépendance des protocoles vis-à-vis des hyperparamètres (introduits par la fonction de covariance du processus stochastique) est traité par une approche de type maximin de l'efficacité, et aboutit à la définition d'un nouveau critère d'optimalité, dont l'optimisation est rendue possible par l'emploi d'une interpolation dans l'évaluation du critère. Les protocoles optimaux obtenus prouvent leurs bonnes performances vis-à-vis d'autres critères et se comparent favorablement à d'autres protocoles issus de critères de la littérature. L'application de la démarche à la conception d'un débitmètre robuste aux singularités de conduite permet d'illustrer comment introduire des connaissances a priori précises sur la nature de l'erreur structurelle, ici des données issues de codes aux éléments finis.

**Abstract.** We deal with the problem of model robust design of experiments for regression, when the regression model is parametric, linear with respect to parameters. The model error is modelled by a stochastic process, Gaussian or more generally which possess a second order moment. The case of standard least squares estimation for the regression parameters with the integrated squared prediction error (ISPE) as performance criterion for the predictor is mainly considered, but the approach remains valid for weighted least squares and for all linear functional of the prediction error as performance criterion. The optimality criteria defined are based on total expectation (with respect to the joint distribution of noise and model error) of the ISPE and quantile of the ISPE, which are optimized for exact designs by a particle swarm method. Optimization of the quantile criterion required to develop an efficient numerical method to approximate the quantile of a sum of squares of correlated Gaussian variables. The problem of dependence of optimal designs with respect to hyperparameters (introduced by the process covariance function) is treated by a maximin approach, and leads to the definition of a new optimality criterion, whose optimization is made possible by using an interpolation for criterion evaluation. Resulting optimal designs are proven to be efficient with respect to other criteria and compare favorably to other designs from the literature. Application of the approach to the design of a flowmeter robust to pipe singularities illustrates how to introduce precise a priori knowledge about the nature of the model error, here some data computed by a finite elements code.



# Table des matières

Liste des sigles et notations	xi
Introduction	1
<b>1 Planification d'expériences pour la prédiction</b>	<b>5</b>
1.1 Problématique générale . . . . .	6
1.2 Définitions et notions essentielles . . . . .	7
1.2.1 Protocole exact, protocole statistique . . . . .	7
1.2.2 Planification locale, bayésienne, séquentielle . . . . .	9
1.2.3 Efficacité . . . . .	10
1.3 Structure de modèle . . . . .	10
1.3.1 Modèles phénoménologiques et comportementaux . . . . .	10
1.3.2 Choix entre plusieurs structures . . . . .	12
1.3.3 Robustesse vis-à-vis d'une erreur structurelle . . . . .	13
1.4 Critère d'optimalité d'un protocole : approche classique . . . . .	14
<b>2 Planification robuste à une incertitude sur la structure de modèle</b>	<b>19</b>
2.1 Travaux de Cook & Nachtsheim (1982) . . . . .	20
2.2 Travaux de Liu & Wiens (1997) . . . . .	23
2.3 Travaux de Allen, Yu & Schmitz (2003) . . . . .	27
2.4 Travaux de Yue & Hickernell (1999) . . . . .	31
2.5 Conclusion . . . . .	37
<b>3 Nouveaux critères pour la planification robuste à une erreur structurelle</b>	<b>39</b>
3.1 Rappel des hypothèses . . . . .	40
3.2 Calcul de l'IEQP . . . . .	41
3.3 Critères d'optimalité . . . . .	43
3.3.1 Espérance totale de l'IEQP (ETIEQP) . . . . .	43
3.3.2 Quantile de l'IEQP (QIEQP) . . . . .	44
3.3.3 Fonction de covariance et condition d'orthogonalité . . . . .	45
3.3.4 Extensions à un cadre plus général . . . . .	48
3.4 Protocoles optimaux . . . . .	49
3.4.1 Spécification d'un contexte pour l'analyse des protocoles optimaux . . . . .	49

---

3.4.2	Hyperparamètres . . . . .	51
3.4.3	Résultats de l'optimisation . . . . .	53
3.5	S'affranchir des hyperparamètres . . . . .	63
3.5.1	Un critère maximin sur l'efficacité . . . . .	63
3.5.2	Spécificités des critères $\mathcal{T}$ et $\mathcal{Q}$ . . . . .	65
3.5.3	Protocoles $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux . . . . .	67
3.6	Comparaisons . . . . .	70
3.6.1	Protocoles $\mathcal{T}$ - et $\mathcal{Q}$ -optimaux . . . . .	71
3.6.2	Protocoles à distance minimax et à distance maximin . . . . .	73
3.6.3	Protocoles EIMSE-optimaux (Allen, Yu & Schmitz) . . . . .	77
3.7	Conclusion . . . . .	80
<b>4</b>	<b>Considérations numériques</b>	<b>81</b>
4.1	Calcul du quantile . . . . .	82
4.1.1	Description de la méthode . . . . .	82
4.1.2	Réglage des paramètres de calcul . . . . .	83
4.2	Optimisation des critères d'optimalité . . . . .	92
4.2.1	Introduction . . . . .	92
4.2.2	Méthode générale d'optimisation par essaim de particules . . . . .	93
4.2.3	Mise en œuvre pour les critères $\mathcal{T}$ et $\mathcal{Q}$ . . . . .	93
4.2.4	Mise en œuvre pour le critère $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ . . . . .	94
4.3	Conclusion . . . . .	97
<b>5</b>	<b>Application</b>	<b>99</b>
5.1	Débitmétrie par vélocimétrie laser . . . . .	100
5.2	Formulation du problème et connaissance a priori . . . . .	100
5.3	Choix des fonctions de régression . . . . .	101
5.4	Fonction moment d'ordre deux de l'erreur structurelle . . . . .	103
5.5	Estimation et critères . . . . .	105
5.6	Résultats . . . . .	107
5.7	Conclusion . . . . .	111
	<b>Bilan et perspectives</b>	<b>113</b>
	<b>Annexe</b>	<b>117</b>

---

# Liste des sigles et notations

Nous avons regroupé ci-dessous les principaux sigles et notations employées dans le document. Les notations correspondant à des notions ou des objets courants sont présentées indépendamment des notations spécifiques à nos travaux.

Par souci de cohérence et de lisibilité, nous nous sommes efforcés de noter les grandeurs vectorielles en gras, et les grandeurs matricielles en gras majuscules.

## Sigles

DDP	densité de probabilité
EIMSE	<i>expected integrated mean square error</i>
EQM	erreur quadratique moyenne
ETIEQP	espérance totale de l'IEQP
IEQP	intégrale de l'erreur quadratique de prédiction
iid	indépendant(e)s et identiquement distribué(e)s
IV	<i>integrated variance</i>
MC	moindres carrés (standards)
MCP	moindres carrés pondérés
MIF	matrice d'information de Fisher
QIEQP	quantile de l'IEQP
RKHS	<i>reproducing kernel Hilbert space</i>
TB	terme de biais

## Notations générales

$\mathbf{0}_{I \times J}$	matrice de zéros (de taille $I \times J$ )
$\mathbf{1}_{I \times J}$	matrice de uns (de taille $I \times J$ )
$\mathbf{A}^\top$	transposée (d'une matrice $\mathbf{A}$ )
$\det[\mathbf{A}]$	déterminant (d'une matrice $\mathbf{A}$ )
$E(\cdot)$	partie entière
$\mathcal{E}_{\mathcal{J}}(\xi)$	efficacité (d'un protocole $\xi$ par rapport à un critère $\mathcal{J}$ )
$\mathbb{E}_X\{\cdot\}$	espérance (par rapport à la loi d'une variable aléatoire $X$ )
$\mathbb{F}_X(\cdot)$	fonction de répartition (d'une variable aléatoire $X$ )
$\mathcal{F}\{\cdot\}$	transformée de Fourier

---

$\mathbf{I}_n$	matrice identité (d'ordre $n$ )
$\mathbf{I}_{fg}$	matrice d'intégrales de produits de fonctions (de terme général $\int f_i g_j$ )
$i$	racine carrée de $-1$
$\mathcal{N}(m, \sigma^2)$	loi normale (de moyenne $m$ et de variance $\sigma^2$ )
$\mathbf{Q}_\nu[X]$	quantile (d'ordre $\nu$ d'une variable aléatoire $X$ )
$\mathbb{R}$	ensemble des nombres réels
$\wp(\cdot)$	densité de probabilité
$\text{tr}[\mathbf{A}]$	trace (d'une matrice $\mathbf{A}$ )
$\delta_{z_0} = \delta(z - z_0)$	distribution de Dirac centrée en $z_0$
$\Lambda_i ; \mathbf{\Lambda}(\mathbf{A})$	valeurs propres (d'une matrice $\mathbf{A}$ )
$\Phi_X(\cdot)$	fonction caractéristique (d'une variable aléatoire $X$ )

## Notations spécifiques

$c(\cdot, \cdot)$	fonction de covariance de l'erreur structurelle
$\mathbf{C}_n$	matrice de covariance de l'erreur structurelle aux points d'observation
$\mathbf{c}_n(\cdot)$	vecteur des fonctions de covariance de l'erreur structurelle avec $\mathbf{r}_n$
$d$	degré du polynôme de régression
$e_i ; \mathbf{e}_n$	bruits d'observation [ $\mathbf{e}_n = (e_1, \dots, e_n)^\top$ ]
$\mathcal{M}_2^T(\cdot)$	critère d'optimalité de $\mathcal{T}$ -efficacité maximin
$\mathcal{M}_2^Q(\cdot)$	critère d'optimalité de $\mathcal{Q}$ -efficacité maximin
$n$	taille du protocole expérimental ( <i>i.e.</i> nombre d'expériences)
$N_d$	nombre de points de discrétisation pour l'intégrale $\int r^2$
$N_{vp}$	nombre de valeurs propres calculées pour l'estimation du quantile
$p$	nombre de paramètres de régression
$Q$	débit
$\mathcal{Q}(\cdot)$	critère d'optimalité fondé sur le quantile de l'IEQP
$r(\cdot)$	erreur structurelle
$r_i ; \mathbf{r}_n$	valeurs de l'erreur structurelle aux points d'observation [ $\mathbf{r}_n = (r_1, \dots, r_n)^\top$ ]
$s$	dimension du domaine expérimental ( <i>i.e.</i> nombre de grandeurs d'entrée)
$t(\cdot)$	fonction-cible
$t_i ; \mathbf{t}_n$	valeurs de la cible aux points d'observation [ $\mathbf{t}_n = (t_1, \dots, t_n)^\top$ ]
$\hat{t}(\cdot)$	prédicteur
$\mathcal{T}(\cdot)$	critère d'optimalité fondé sur l'espérance totale de l'IEQP
$\mathbf{x} ; x$	vecteur des entrées [taille $s$ quelconque ; $s = 1$ ]
$x_{\{i\}}$	$i$ -ième composante de $\mathbf{x}$
$x_{[i]}$	statistique d'ordre $i$ d'un protocole exact pour $s = 1$ [ $x_{[1]} \leq \dots \leq x_{[n]}$ ]
$\mathfrak{X}$	domaine expérimental
$\alpha$	paramètre de compromis biais/variance
$\lambda$	distance caractéristique de corrélation
$\phi_i ; \boldsymbol{\phi}$	fonctions de régression [ $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_p)^\top$ ]
$\Phi_n$	matrice de régression

---

---

$\sigma_e^2$	variance du bruit d'observation
$\zeta^2$	variance de l'erreur structurelle
$\theta_i ; \boldsymbol{\theta}$	paramètres de régression [ $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_p)^\top$ ]
$\hat{\theta}_i ; \hat{\boldsymbol{\theta}}$	estimées des paramètres [ $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_p)^\top$ ]
$\xi$	protocole au sens général
$\boldsymbol{\xi}_n$	protocole exact de taille $n$
$\xi^{\mathcal{J}} ; \boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}}$	protocole optimal au sens d'un critère $\mathcal{J}$ [cas général ; protocole exact]

---



# Introduction

L'appréhension naturelle du monde par l'esprit humain, d'une manière générale et dans le domaine des sciences en particulier, se nourrit de la description des phénomènes au travers de grandeurs quantitatives. Acquérir la connaissance des valeurs de ces grandeurs nécessite l'observation des phénomènes. Le positionnement scientifique requiert une démarche active dans l'observation, et conduit à l'expérimentation, dont on juge la valeur par l'information qu'elle apporte à la connaissance du phénomène. Rechercher les meilleures expériences en ce sens est alors une démarche naturelle. C'est l'idée sous-jacente au concept de la planification d'expériences.

L'approche statistique pour la planification d'expériences trouve ses racines dans les travaux fondateurs de Fisher [1] en analyse de la variance. Parallèlement [2] à ces travaux s'est développée la planification d'expériences pour la régression, où le modèle mathématique de représentation des données est l'élément central du problème. Classiquement, la structure de ce modèle est supposée exactement déterminée, c'est-à-dire que les données recueillies sont parfaitement représentées par un élément de l'ensemble des modèles qu'elle définit. Le plan d'expériences — aussi dit protocole expérimental — optimal est défini comme celui qui permettra le meilleur choix d'un modèle parmi cet ensemble. On infère alors le critère d'optimalité du protocole à partir du critère de choix du modèle, appelé critère de performance.

Le premier chapitre introduit les notions fondamentales et l'approche classique de la planification d'expériences.

Lorsque la connaissance a priori du phénomène à étudier est insuffisante, ou que le nombre d'expériences réalisables est restreint par des contraintes de type matériel, temporel ou financier, limitant la complexité du modèle, on peut douter de la capacité de la structure choisie à représenter convenablement les données, ou hésiter entre plusieurs structures. Il convient alors de tenir compte de cette incertitude sur la structure dès la phase de planification, sous peine de dégrader significativement la qualité des résultats. La planification d'expériences robuste à une telle incertitude a été introduite par les travaux de Box & Draper [3]. La mise en œuvre d'une approche robuste nécessite de caractériser l'incertitude sur la structure. Cette caractérisation peut être réalisée au travers d'hypothèses sur l'erreur structurelle, c'est-à-dire l'écart entre la structure de régression et une structure supposée représenter plus précisément les données. Les divers travaux en planification robuste diffèrent alors non seulement par la structure de régression choisie et par

---

le critère de performance de l'estimation, mais également par le choix de caractérisation de l'incertitude structurelle.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation d'une sélection de travaux en planification robuste, donnant un aperçu des approches existantes et éclairant le cheminement de notre réflexion.

Nous nous proposons ici de traiter le problème de planification robuste dans le cas d'une structure de régression paramétrique, linéaire par rapport aux paramètres. Afin de prendre en considération un large éventail d'erreurs structurelles potentielles, tout en conservant la possibilité d'introduire de l'information a priori, nous modélisons l'erreur structurelle de façon originale par un processus stochastique, gaussien ou plus généralement qui possède un moment d'ordre deux. De façon plus classique, nous considérons principalement le cas de l'estimation des paramètres de régression par moindres carrés, couplée à un critère de performance du type intégrale de l'erreur quadratique de prédiction (IEQP), mais la démarche reste valable pour les moindres carrés pondérés, et pour des critères de performance quadratiques sur toute fonctionnelle linéaire de l'erreur de prédiction.

Le premier critère d'optimalité retenu est fondé sur l'espérance totale de l'IEQP, conformément à la littérature. Dans l'idée d'adopter une démarche plus robuste aux grandes erreurs, mais avec la volonté de la maîtrise de la robustesse, nous définissons également un nouveau critère fondé sur le quantile de l'IEQP. Nous analysons les protocoles optimaux obtenus dans le cas particulier d'une structure de régression polynomiale et d'une fonction de covariance gaussienne pour l'erreur structurelle. Les protocoles optimaux dépendent en particulier des paramètres de cette fonction de covariance.

Ce problème de la dépendance vis-à-vis d'hyperparamètres est récurrent en planification robuste. Soucieux de rester dans une démarche la plus robuste possible, nous le traitons ici par une approche de type maximin de l'efficacité qui aboutit à la définition d'un nouveau critère d'optimalité.

Le troisième chapitre expose en détail l'ensemble de notre démarche.

Plusieurs défis numériques naissent de la recherche de ces protocoles optimaux. L'optimisation des critères pour l'obtention de protocoles exacts est notamment un problème délicat d'optimisation globale. Nous utilisons une méthode d'optimisation par essaim de particules, adaptée à ce type de situation. L'optimisation du critère du quantile de l'IEQP nécessite par ailleurs un moyen de calculer ce quantile en un temps raisonnable, compatible avec l'optimisation. Une méthode de Monte Carlo n'étant pas satisfaisante, nous développons une méthode spécifique d'estimation rapide et précise du quantile, utilisable pour une somme de carrés de variables gaussiennes corrélées. Le critère maximin de l'efficacité pose également une difficulté en termes de temps de calcul, puisque l'évaluation du critère elle-même nécessiterait une optimisation. Cette difficulté est écartée grâce à l'emploi d'une interpolation pour l'évaluation du critère.

L'ensemble des méthodes numériques spécifiques utilisées est présenté au chapitre 4.

La démarche développée est finalement appliquée à la conception d'un débitmètre robuste aux singularités géométriques de la conduite dans laquelle circule le fluide. Cette

---

application illustre comment la démarche s'adapte à un problème donné, et notamment de quelle manière la spécification choisie pour l'erreur structurelle autorise l'introduction d'information a priori — ici des données simulées issues de code aux éléments finis.

Cette application fait l'objet du chapitre 5.

## Publications

### Sur le sujet de la thèse

- Morgan Roger, Laurent Le Brusquet, et Gilles Fleury, "A criterion for model-robust design of experiments," in *MLSP 2004, IEEE International Workshop on Machine Learning for Signal Processing*, octobre 2004, pp. 33–42.
- Morgan Roger, Laurent Le Brusquet, et Gilles Fleury, "Planification d'expériences : un nouveau critère et son optimisation," in *ROADEF '05, 6ème congrès de la Société Française de Recherche Opérationnelle et d'Aide à la Décision*, 2005, pp. 316–317.

### Extension dans le cadre d'une collaboration

- Hassan El Abiad, Laurent Le Brusquet, Morgan Roger, et Marie-Ève Davoust, "Model-robust sequential design of experiments for identification problems," in *International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*, avril 2007, pp. 441–444.



# Chapitre 1

## Planification d'expériences pour la prédiction

Ce chapitre présente le contexte général de la planification d'expériences pour la prédiction et introduit les notions utiles au lecteur. Le cheminement aboutit en fin de chapitre à la problématique spécifique traitée dans le cadre de cette thèse.

## 1.1 Problématique générale

Imaginons que l'on soit en présence d'un système quelconque, dont on désire connaître une grandeur d'intérêt, indisponible à l'observation directe. Il est naturel de chercher à inférer sa valeur à partir d'une ou plusieurs grandeurs directement observables et qui lui sont liées. Autrement dit, nous souhaitons caractériser la relation supposée entre la grandeur d'intérêt, que nous nommerons sortie ou **cible**, et les grandeurs dont elle dépend, que nous nommerons **entrées**. L'idée sous-jacente est celle de la régression.

De manière générale, la régression nécessite au préalable :

- la spécification d'un **domaine** de représentation, c'est-à-dire la définition de l'ensemble des valeurs des entrées pour lesquelles la cible doit être prédite ;
- la spécification de la méthode de régression, c'est-à-dire le choix d'une **structure de modèle**;<sup>1</sup>
- le choix d'un **estimateur**, c'est-à-dire la façon dont les **paramètres** du modèle seront estimés ;
- et enfin la récolte d'un jeu de données, c'est-à-dire un ensemble d'expériences pour lesquelles les valeurs des entrées et de la cible sont observées conjointement.

Les différents choix à effectuer sont en principe guidés par les contraintes matérielles et par une certaine connaissance a priori. Mais une question qui se pose avant la récolte des données est la suivante : certaines expériences seront-elles plus pertinentes que d'autres vis-à-vis du but poursuivi ? Et si oui, quelles sont les plus pertinentes, c'est-à-dire quelles sont celles qui donneront le meilleur prédicteur ?

Le domaine de la planification d'expériences pour la prédiction affirme que l'on peut répondre à la première question par l'affirmative et s'attache donc à résoudre la problématique posée par la seconde.

Plus formellement, l'objectif est de caractériser la relation fonctionnelle supposée entre la cible  $t$  (réelle) et les entrées, regroupées dans un vecteur  $\mathbf{x}$ , sur le domaine  $\mathfrak{X}$  :

$$\begin{aligned} t: \mathfrak{X} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\longmapsto t(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Le **prédicteur**  $\hat{t}$ , établi à partir des données récoltées, ne sera qu'une approximation de cette relation, et on quantifiera la qualité de l'approximation par un **critère de performance**. La qualité du prédicteur obtenu dépend en particulier de la précision avec laquelle les données auront pu être récoltées. Plus précisément, les données constituent un ensemble de  $n$  points  $\{(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathfrak{X} \times \mathbb{R}, i = 1, \dots, n\}$ , où les  $y_i$  sont des observations bruitées de la cible pour les entrées  $\mathbf{x}_i$  :

$$y_i = t(\mathbf{x}_i) + e_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Le but de la planification d'expériences est de choisir de manière optimale le **protocole expérimental**, c'est-à-dire l'ensemble  $\boldsymbol{\xi}_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$  des entrées à appliquer lors des

<sup>1</sup>On parle d'habitude volontiers de structure de modèle pour la régression paramétrique. Il est conceptuellement possible d'étendre cette notion aux méthodes non-paramétriques et en particulier aux méthodes à noyau : la notion de structure de modèle prenant alors en compte le choix du noyau.

expériences qui serviront à recueillir les données. Dans le cas le plus général, les valeurs optimales des entrées dépendent des hypothèses faites sur la loi de probabilité des  $e_i$ .

Le choix d'une structure de modèle définit l'**espace de régression**, c'est-à-dire l'ensemble des prédicteurs qui peuvent être obtenus par ce type de régression. Dans le cas d'une régression paramétrique linéaire par exemple, il s'agit de l'espace vectoriel engendré par les fonctions de régression. Le prédicteur est défini dans cet espace de régression par les paramètres du modèle, qui seront estimés à partir des données. Dans le cas d'une régression non-paramétrique ou semi-paramétrique, on emploie volontiers le terme **hyperparamètres**, mais en général, ceux-ci sont aussi estimés à partir des données. Les valeurs optimales des entrées dépendent également des choix effectués pour la structure de modèle et de la méthode d'estimation des paramètres.

En somme, les valeurs optimales des entrées dépendent :

- de la structure du modèle,
- de la méthode d'estimation des paramètres ou hyperparamètres du modèle,
- de la loi du bruit,
- du critère de performance du prédicteur.

Classiquement, les bruits d'observation sont considérés indépendants et identiquement distribués (iid) selon une loi gaussienne centrée, dont la variance sera notée  $\sigma_e^2$  :

$$\mathbf{e}_n \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{n \times 1}, \sigma_e^2 \mathbf{I}_n), \quad (1.1)$$

avec  $\mathbf{I}_n$  la matrice identité d'ordre  $n$ .

Quelques auteurs se sont penchés sur le problème des bruits corrélés, parmi lesquels Müller & Pázman [4]. Nous nous plaçons sous l'hypothèse classique.

Nous abordons dans la suite du chapitre les autres points, avec une emphase particulière sur la structure de modèle, et leurs liens avec la planification d'expériences. Mais d'abord, la section suivante rappelle les définitions des notions essentielles que nous utiliserons dans le reste du document.

## 1.2 Définitions et notions essentielles

### 1.2.1 Protocole exact, protocole statistique

On parle d'expérience pour désigner le fait d'observer la cible pour une valeur fixée des entrées. Le résultat d'une expérience, la valeur observée de la cible, est appelée **observation**. Dans l'idée de réduire l'influence du bruit sur la prédiction, certaines expériences peuvent être répétées, c'est-à-dire effectuées pour une même valeur des entrées. Du point de vue du protocole, on aura alors  $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$  pour  $i \neq j$ . C'est le type de représentation que nous adoptons. On parle dans ce cas de protocole **exact**.

On peut également décrire un protocole exact par les couples  $\{(\mathbf{x}_i, n_i), 1 \leq i \leq N_s\}$

où  $N_s$  est le nombre de valeurs distinctes des entrées, ou nombre de **points de support** du protocole, et  $n_i$  le nombre de **répétitions** associé à la valeur  $\mathbf{x}_i$  des entrées. Quand le nombre d'expériences devient grand par rapport au nombre de paramètres à estimer, la proportion  $n_i/n$  d'expériences allouée à chaque point de support peut varier presque continûment. Autoriser une variation continue des proportions (ce qui équivaut à faire l'approximation que le nombre d'expériences est infini) permet de traiter le problème de façon plus simple, non seulement du point de vue théorique, mais aussi du point de vue algorithmique pour l'optimisation numérique (voir [5], [6]). C'est pourquoi la notion de protocole **statistique** a été introduite, c'est-à-dire un protocole défini par un support discret et par des « masses » affectées aux points de support, qui reflètent la proportion d'expériences à effectuer pour la valeur correspondante des entrées.

La notion de proportions impose que la somme des masses soit égale à 1. On peut alors aisément voir la similitude entre un protocole statistique et une densité de probabilité discrète. Kiefer & Wolfowitz [7] ont été les premiers à étendre la notion de protocole à n'importe quelle densité de probabilité sur le domaine expérimental. On parle dans ce cas de protocole **continu**. L'utilisation de ce formalisme a permis de pousser les développements mathématiques de la planification d'expériences, en particulier avec la théorie **convexe** [6], et d'aboutir aux théorèmes dits d'équivalence, dont le plus célèbre est le théorème de Kiefer & Wolfowitz (théorème 1.1, section 1.4).

Nous notons  $\xi$  un protocole au sens général du terme. La notation  $\xi_n$  sera réservée aux protocoles exacts. Un protocole exact sera décrit par les  $\{\mathbf{x}_i, 1 \leq i \leq n\}$ , et un protocole statistique par les couples  $\{(\mathbf{x}_i, m_i), 1 \leq i \leq N_s\}$ , où  $m_i$  est la masse allouée au point de support  $\mathbf{x}_i$ . Par analogie avec les densités de probabilité, la notation  $\xi(\mathbf{x}_i) = m_i$  sera également utilisée.

Contrairement à une pratique courante dans la littérature, mais par souci de clarté dans ce document, la notation

$$\begin{Bmatrix} x_{1\{1\}} & x_{2\{1\}} & \cdots & x_{n\{1\}} \\ x_{1\{2\}} & x_{2\{2\}} & \cdots & x_{n\{2\}} \end{Bmatrix}$$

utilisée à la section 3.5.3 ne désigne pas un protocole statistique mais bien un protocole exact dans le cas de deux entrées :  $\mathbf{x}_i = (x_{i\{1\}}, x_{i\{2\}})^\top$ .

Du point de vue de l'expérimentateur, les protocoles statistiques peuvent rarement être mis en pratique. En effet, que le nombre  $n$  d'expériences soit fixé ou non à l'avance, il est rare que les masses d'un protocole optimal correspondent à un nombre entier d'expériences (exception faite des protocoles  $D$ -optimaux, cf. section 1.4). On peut cependant essayer de trouver une série d'expériences avec les mêmes points de support et des répétitions qui permettent d'approcher au mieux le protocole statistique optimal. Pukelsheim ([6] chap. 12) donne une telle méthode de répartition. Comme il le souligne lui-même, cette méthode ne peut garantir l'optimalité du protocole exact obtenu mais celui-ci est sans doute un bon choix « *si le nombre d'expériences est suffisamment grand devant le nombre de paramètres à estimer* », c'est-à-dire si les proportions du protocole exact obtenu sont suffisamment proches des masses du protocole statistique optimal.

Compte tenu du caractère infini de l'ensemble des points de support, l'approximation

d'un protocole continu par un protocole exact est une affaire autrement plus délicate, mais dans le cas des modèles paramétriques et pour la plupart des critères classiques, fondés sur la matrice d'information de Fisher (cf. section 1.4), les protocoles continus sont équivalents aux protocoles statistiques en ce sens que, à toute matrice de Fisher d'ordre  $p$ , on peut faire correspondre un protocole statistique à au plus  $p(p+1)/2 + 1$  points de support (par le théorème de Carathéodory, voir par exemple Berger [8]). Ce résultat ne peut malheureusement pas être étendu à un critère quelconque.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons spécifiquement aux protocoles exacts car nous faisons l'hypothèse que le nombre d'expériences est du même ordre de grandeur que le nombre de paramètres à estimer. Par conséquent, dans la suite du document, le terme protocole désigne par défaut un protocole exact.

### 1.2.2 Planification locale, bayésienne, séquentielle

Dans le cas le plus général, le protocole optimal dépend de la valeur des paramètres de régression — ou les hyperparamètres dans le cas non-paramétrique. Cela pose naturellement problème, dans le sens où celle-ci est normalement inconnue. Dans cette situation, on a alors le choix entre :

- prendre un a priori sur la valeur des paramètres,
- renoncer à faire de la planification optimale au sens des hypothèses sur la structure de modèle choisie.

La première option consiste à faire une planification **locale**, c'est-à-dire à fixer de manière plus ou moins arbitraire une valeur des paramètres pour laquelle le protocole sera optimal ; ou, plus généralement, une planification **bayésienne** en prenant une densité de probabilité a priori sur la valeur des paramètres. La deuxième option consiste à utiliser une méthode de planification indépendante de la structure de modèle choisie, fondée sur des hypothèses plus générales sur la cible, comme par exemple sa régularité [9], ou des considérations encore plus générales de qualité intrinsèque d'un protocole, telles que des considérations géométriques [10].

Dans ces situations, selon la qualité du résultat recherchée et la validité que l'on donne à l'a priori utilisé pour la planification, une deuxième série d'expériences, à la suite de l'analyse des données de la première série, peut être nécessaire. Il s'agit alors de planification **séquentielle**, qui consiste en la succession alternée de phases de planification et de phases d'analyse des données. Chaque série d'expériences apporte de l'information qui sera utilisée comme a priori pour planifier les expériences de l'étape suivante.

**REMARQUE.** *Les difficultés entraînées par la dépendance du protocole optimal envers les paramètres de régression expliquent la grande popularité en planification d'expériences des structures de modèle linéaires par rapport aux paramètres (LP). Avec ces structures, les protocoles optimaux pour les critères classiques sont en effet indépendants de ces paramètres. (cf. section 1.3.1).*

### 1.2.3 Efficacité

Pour pouvoir comparer des protocoles entre eux vis-à-vis d'un critère donné, la notion d'**efficacité** a été introduite en planification d'expériences. Elle quantifie la qualité d'un protocole par rapport à un critère donné, et est comprise entre 0 et 1, l'efficacité maximale étant obtenue pour un protocole optimal.

Pour un critère  $\mathcal{J}$  positif à minimiser dépendant d'un vecteur de paramètres/hyperparamètres  $\mathbf{h}$ , on définit l'efficacité d'un protocole  $\xi$  par le rapport

$$\mathcal{E}_{\mathcal{J}(\mathbf{h})}(\xi) \triangleq \frac{\mathcal{J}^*(\mathbf{h})}{\mathcal{J}(\xi, \mathbf{h})}, \quad (1.2)$$

avec  $\mathcal{J}^*(\mathbf{h})$  la valeur du critère à l'optimum, étant donnés les paramètres  $\mathbf{h}$ . Pour un critère à maximiser, le rapport s'inverse de façon à conserver la variation entre 0 et 1.

Ces quelques définitions étant introduites, nous pouvons maintenant nous tourner vers un des aspects centraux de la régression et de la planification d'expériences : la structure de modèle.

## 1.3 Structure de modèle

### 1.3.1 Modèles phénoménologiques et comportementaux

Lorsque l'on dispose d'une connaissance a priori suffisamment précise du système à modéliser, il est naturel de la prendre en compte dans le choix de la structure du modèle. Par exemple, si les lois physiques qui régissent le système sont connues avec précision, une mise en équations peut donner, à certaines constantes près et moyennant la connaissance de certains paramètres caractéristiques du système, une relation théorique entre les entrées et la cible. Les expériences à planifier permettront d'estimer ces constantes et ces paramètres ayant une signification physique. Le modèle obtenu est alors appelé modèle **phénoménologique** [5]. L'inconvénient majeur de ces structures est qu'elles sont généralement non linéaires par rapport aux paramètres, ce qui implique que les protocoles optimaux dépendent des valeurs des paramètres, généralement inconnues a priori puisque le but de la démarche est justement de les estimer. Une manière de contourner ce problème est de réaliser une planification **locale** (cf. section 1.2.2).

Au contraire, dans le cas où le système est mal connu, ou si les lois physiques qui le régissent sont trop complexes pour obtenir une relation directe entre les entrées et la cible, on aura plutôt recours à un modèle **comportemental**, c'est-à-dire censé représenter empiriquement le comportement entrées-sortie du système. Cela laisse bien évidemment plus de liberté dans le choix de la structure, et l'on pourra choisir des structures suffisamment « simples » pour permettre une estimation aisée des paramètres. En particulier, les struc-

tures LP occupent une place importante dans la littérature de planification d'expériences (cf. section 1.2.2).

Dans le cadre de cette thèse, nous nous plaçons dans le cas où la connaissance a priori est limitée. Nous avons donc choisi de nous attacher spécifiquement aux modèles comportementaux, et plus particulièrement aux **prédicteurs linéaires**, une classe de méthodes de régression de forme générale

$$\hat{t}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\psi}^\top(\mathbf{x})\mathbf{y}_n,$$

où  $\mathbf{y}_n = (y_1, \dots, y_n)^\top$  est le vecteur des observations et  $\boldsymbol{\psi}$  dépend de la structure sélectionnée et du protocole expérimental. Cette classe inclut notamment la régression paramétrique linéaire simple, avec estimation des paramètres par moindres carrés, qui tient une place prépondérante dans la littérature de la planification d'expériences, ([6], [9], [11], [12], [13], [14], [15]). Dans ce cas, en notant  $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_p)^\top$  le vecteur des fonctions de régression, et  $\mathbf{\Phi}_n$  la matrice de régression — de terme général  $\phi_j(\mathbf{x}_i)$  —, les paramètres de régression  $\boldsymbol{\theta}$  sont estimés par  $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{MC} = (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{y}_n$  et on a donc :

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = \mathbf{\Phi}_n (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}). \quad (1.3)$$

En régression paramétrique linéaire bayésienne, avec l'hypothèse (1.1) d'un bruit iid normal centré de variance  $\sigma_e^2$  et un a priori gaussien centré  $\boldsymbol{\theta} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{p \times 1}, \boldsymbol{\Sigma}_\theta)$  pour les paramètres de régression, on montre [16] que l'estimation au sens du maximum *a posteriori* (MAP) donne :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) &= \mathbf{\Phi}_n (\sigma_e^2 \boldsymbol{\Sigma}_\theta^{-1} + \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \\ &= (\mathbf{\Phi}_n \boldsymbol{\Sigma}_\theta \mathbf{\Phi}_n^\top + \sigma_e^2 \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n \boldsymbol{\Sigma}_\theta \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

(la deuxième forme étant obtenue par application du lemme d'inversion matricielle).

Certaines méthodes de régression non-paramétrique ou semi-paramétrique font également partie de cette classe. La régression par processus gaussien (méthode **à noyau**), par exemple, est une généralisation de la régression paramétrique linéaire bayésienne [16]. En notant  $c(\cdot, \cdot)$  la fonction de covariance du processus,  $\mathbf{c}_n(\mathbf{x})$  le vecteur  $n \times 1$  dont la  $i$ -ième composante est  $c(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$  et  $\mathbf{C}_n$  la matrice de covariance du protocole, i.e.  $(\mathbf{C}_n)_{ij} = c(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ , on peut écrire [16] :

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = (\mathbf{C}_n + \sigma_e^2 \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{c}_n(\mathbf{x}).$$

On retrouve effectivement la régression paramétrique linéaire bayésienne dans le cas particulier où la fonction de covariance peut s'exprimer sous la forme  $c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{\Sigma}_\theta \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}')$ . La régression par processus gaussien (PG) permet quant à elle de prendre une fonction de covariance quelconque (à condition qu'elle soit positive), ce qui permet en particulier d'obtenir des espaces de régression de dimension infinie. La littérature sur le sujet propose des fonctions de covariance correspondant à d'autres méthodes de prédiction plus classiques, telles que les splines par exemple (se reporter à [16] pour plus de détails). Le choix de la structure est en fin de compte reporté sur le choix de la fonction de

covariance, qui peut refléter une connaissance a priori. En effet, ce choix consiste généralement à sélectionner une famille paramétrée de fonctions, puis à chercher la valeur des paramètres/hyperparamètres) qui permettent de rendre compte au mieux du comportement du système.

La régression par processus gaussien est elle-même un cas particulier d'une méthode semi-paramétrique appelée krigeage [17], qui combine une régression paramétrique LP et une régression par processus gaussien sur les résidus de cette régression paramétrique.

Le choix de la structure est rarement immédiat, et dans certains cas, plusieurs structures peuvent sembler convenir a priori. Nous abordons cet aspect dans la section suivante.

### 1.3.2 Choix entre plusieurs structures

Il peut arriver que plusieurs structures de modèles soient en concurrence pour représenter le comportement du système, et cela aussi bien pour les modèles comportementaux que phénoménologiques. En effet, dans le cas de ces derniers, la connaissance a priori sur le système peut consister en plusieurs théories concurrentes, qui mènent à différentes structures de modèles.

Dans le cas de modèles comportementaux, il n'est pas rare d'hésiter entre plusieurs structures, puisque la connaissance a priori est justement insuffisante pour établir un modèle phénoménologique. Par exemple, si un modèle polynomial est sélectionné, le choix du degré peut être délicat.

Une branche de la planification d'expériences s'intéresse à la discrimination entre structures de modèle. Cela peut permettre notamment, dans le cas de modèles phénoménologiques, de valider ou d'invalider une théorie, ou plutôt de favoriser une théorie par rapport à une autre. Généralement, l'objectif de discrimination est malheureusement contradictoire avec l'objectif de prédiction, et il peut s'avérer nécessaire de faire une planification séquentielle pour obtenir une prédiction satisfaisante. Une planification conjointe [18], réalisant un compromis entre les deux objectifs peut également être envisageable.

Une autre approche du problème, typiquement utilisée lorsqu'une planification séquentielle n'est pas réalisable, est d'adopter une démarche robuste à une incertitude sur la structure, c'est-à-dire de considérer pour la phase de planification que plusieurs structures sont possibles, et que le protocole doit être performant au sens d'un critère sur l'ensemble des structures envisagées. L'objectif est que le prédicteur soit performant quelle que soit la structure choisie pendant la phase d'analyse des données. Läuter [19] a développé une telle approche, avec un critère de type « en moyenne » en considérant une loi a priori sur un ensemble fini de structures possibles. Nous la présentons à la section 2.1 au travers des travaux de Cook & Nachtsheim. Dans la même lignée, Dette & Franke [20] ont pour leur part utilisé un critère de type maximin.

La démarche robuste peut également être abordée du point de vue de l'erreur structurale, c'est-à-dire en considérant l'écart possible entre le modèle et le comportement réel

---

du système. Nous précisons ce point de vue maintenant.

### 1.3.3 Robustesse vis-à-vis d'une erreur structurelle

La capacité de la structure de modèle choisie a priori à représenter le comportement entrées-sortie du système n'est pas toujours assurée, notamment dans le cas des modèles comportementaux, qui ne sont, par essence, que des tentatives de représentation de ce comportement. Les modèles phénoménologiques, fondés sur des théories physiques, sont moins confrontés à ce problème, mais les approximations sur lesquels ils reposent peuvent être simplificatrices ou erronées. Cela revient à dire que la « vraie » courbe de réponse du système  $t$  n'appartient pas à l'espace de régression spécifié par la structure choisie. On peut alors définir l'**erreur structurelle** par la différence entre  $t$  et sa meilleure approximation parmi l'espace de régression.

En planification d'expériences classique (cf. section 1.4), l'hypothèse est faite que la structure de modèle est exacte, et donc que l'erreur structurelle est nulle. Bien qu'il semble naturel de penser que cette hypothèse est rarement vérifiée, dans certains cas l'erreur structurelle est sans doute suffisamment faible pour pouvoir être négligée. Dans le cas contraire, comme l'ont montré les travaux de Box & Draper [3], utiliser cette hypothèse pour réaliser la planification peut conduire à des prédicteurs peu performants.

Voyons sur un exemple simple, inspiré de ces travaux fondateurs, les conséquences possibles, en termes de prédiction, lorsque l'erreur structurelle est négligée lors de la phase de planification. On choisit pour cible un polynôme de degré 2 sur le domaine expérimental  $\mathcal{X} = [-1; 1]$  et plus précisément

$$t(x) = x^2 + x + 1,$$

qu'on essaie d'approcher au mieux par un polynôme de degré 1. Avec une structure de modèle de prédiction de ce type, les critères classiques (section 1.4), qui ne tiennent pas compte de l'erreur structurelle, sont optimisés pour le protocole dont les points sont aux extrémités du domaine :  $\xi_2 = \{\pm 1\}$ . Prendre en considération l'erreur structurelle, ce que nous désignons par le terme **approche robuste**, suggère [3] d'utiliser le protocole  $\xi_2^R = \{\pm 1/\sqrt{3}\}$  (dit « robuste ») pour minimiser le biais de prédiction (en norme  $\mathcal{L}_2$ ).

La figure 1.1 compare les prédicteurs obtenus. Le biais de prédiction (en norme  $\mathcal{L}_2$ ) obtenu est six fois supérieur pour le protocole  $\xi_2$  !

Au vu de cet exemple, il apparaît impératif de considérer l'erreur structurelle dès la phase de planification, afin de limiter son impact sur la performance du prédicteur. C'est la motivation première de notre démarche.

Gardant ces considérations sur la structure de modèle à l'esprit, nous allons maintenant présenter le cœur de la problématique de la planification d'expériences, qui est la définition du critère d'optimalité à partir des différents éléments dont on dispose.

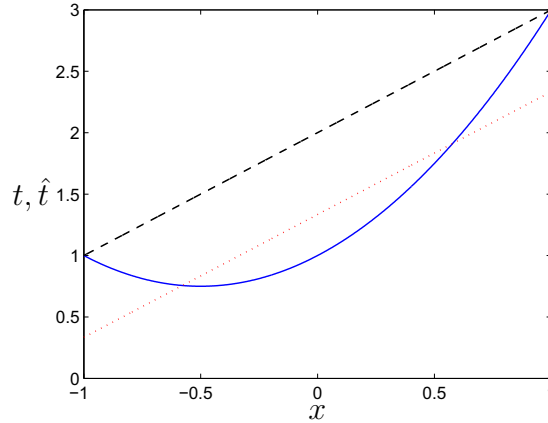


FIG. 1.1 – Fonction-cible (continu) et les deux prédicteurs obtenus pour les protocoles non robuste  $\xi_2$  (tirets) et robuste  $\xi_2^R$  (pointillés).

## 1.4 Critère d'optimalité d'un protocole : approche classique

La question fondamentale est : qu'est-ce qu'un « bon » protocole ?

On dispose pour répondre à cette question des éléments suivants : un objectif, des hypothèses et des contraintes. Un « bon » protocole est un protocole qui nous permettra d'atteindre notre objectif de façon satisfaisante dans les conditions imposées par les hypothèses et les contraintes. L'objectif recherché est formalisé par le choix du critère de performance du prédicteur, qui quantifie la satisfaction donnée par le résultat de la prédiction vis-à-vis de cet objectif. Les hypothèses et les contraintes influent pour leur part sur le choix de la structure de modèle, la modélisation du bruit d'observation, la méthode d'estimation des paramètres, le choix du domaine expérimental, etc. La formalisation de l'ensemble de ces conditions permet alors généralement de définir une fonction, qu'on appelle **critère d'optimalité**, à optimiser pour obtenir le « meilleur » protocole.

Cependant, selon les hypothèses et les contraintes considérées, il est possible que le problème d'optimisation soit délicat à résoudre, par exemple si le critère d'optimalité n'est pas calculable analytiquement et/ou si la dimension du problème est très grande. On est amené dans ce cas à utiliser des critères d'optimalité plus simples, permettant une optimisation aisée, compte tenu notamment de la puissance de calcul disponible.

La plupart des critères classiques sont des fonctions scalaires de la matrice d'information de Fisher (MIF), qui caractérise l'information apportée par un protocole vis-à-vis de l'estimation des paramètres du modèle. On définit cette matrice comme suit [5] :

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n) = \mathbb{E}_{\mathbf{y}_n|\boldsymbol{\theta}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \ln \varphi(\mathbf{y}_n|\boldsymbol{\theta}) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top} \ln \varphi(\mathbf{y}_n|\boldsymbol{\theta}) \right\},$$

Dans le cas où les  $e_i$  sont iid suivant une densité de probabilité  $\varphi(e)$ , on obtient :

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n) = \mathcal{I}_F \sum_{i=1}^n \frac{\partial t(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\theta}} \frac{\partial t(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top}, \quad (1.4)$$

avec  $\mathcal{I}_F$  l'*information de Fisher* [5]

$$\mathcal{I}_F = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{d\varphi(e)}{de} \right)^2 \frac{1}{\varphi(e)} de,$$

qui vaut  $1/\sigma_e^2$  l'inverse de la variance dans le cas d'une distribution normale centrée. Pour les protocoles statistiques, on parle d'information **moyenne par échantillon**. La formule de la MIF est obtenue à partir de (1.4) en prenant la somme sur les points de support et en pondérant par les masses. Pour les protocoles continus, cette somme devient une intégrale :

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n) = \mathcal{I}_F \int_{\mathcal{X}} \frac{\partial t(\mathbf{x})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \frac{\partial t(\mathbf{x})}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top} d\xi(\mathbf{x}).$$

Les fonctions scalaires d'optimalité utilisées sont choisies pour quantifier l'information de manière globale, et dans ce but, il est recommandé qu'elles possèdent certaines propriétés telles que la monotonie, l'homogénéité et la concavité ([6], chap. 5). Une classe générale de fonctions d'optimalité sont les *matrix means* [6] pour  $u \in ]-\infty; 1]$  définies par :

$$o_u(\mathbf{F}) = \begin{cases} \left( \frac{1}{p} \text{tr} [\mathbf{F}^u] \right)^{1/u} & u \notin \{0, -\infty\} \\ |\mathbf{F}|^{1/p} & u = 0 \\ \Lambda_{\min}(\mathbf{F}) & u = -\infty \end{cases}$$

où  $\Lambda_{\min}$  est la valeur propre minimale de  $\mathbf{F}$  et  $p$  l'ordre de  $\mathbf{F}$  (nombre de paramètres de régression). Les critères d'optimalité standards, à maximiser, sont les suivants :

- $o_0$ , critère de  $D$ -optimalité,
- $o_{-1}$ , critère de  $A$ -optimalité,
- $o_{-\infty}$ , critère de  $E$ -optimalité,
- $o_1$ , critère de  $T$ -optimalité.

La MIF peut s'interpréter en termes de qualité de l'estimation des paramètres. Quand on considère classiquement que l'erreur de modèle est nulle, et que la structure de modèle est LP, la MIF s'écrit

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n) &= \mathcal{I}_F \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)^\top \\ &= \mathcal{I}_F \mathbf{M}(\boldsymbol{\xi}_n), \end{aligned}$$

où  $\mathbf{M}(\boldsymbol{\xi}_n)$  est appelée **matrice des moments** du protocole  $\boldsymbol{\xi}_n$ . On peut la mettre sous la forme  $\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n$ . Si de plus les paramètres sont estimés par moindres carrés et que par

ailleurs le bruit suit une loi normale centrée, l'estimation est non biaisée et la MIF n'est rien d'autre que l'inverse de la matrice de covariance des estimées des paramètres :

$$\begin{aligned}\text{cov}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{MC}\} &= \sigma_e^2 (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \\ &= \sigma_e^2 \mathbf{M}^{-1}(\boldsymbol{\xi}_n),\end{aligned}$$

aussi appelée **matrice de dispersion**. Par antonymie, la MIF est alors appelée **matrice de précision**.

Du point de vue de la prédiction, l'approche classique fondée sur la MIF peut donc être justifiée par le fait que dans ce cas simple, la variance de prédiction est une fonction linéaire de l'inverse de la MIF :

$$\begin{aligned}\text{var}\{\hat{t}(\mathbf{x})\} &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) \text{cov}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{MC}\} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \\ &= \sigma_e^2 \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \\ &= \text{tr} [\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) \mathbf{F}^{-1}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n)].\end{aligned}$$

On parle de  $L$ -optimalité quand le critère d'optimalité est une fonction linéaire de la matrice de dispersion. La  $A$ -optimalité en est un cas particulier. Un autre cas particulier courant est la  $I_\mu$ -optimalité, qui correspond à minimiser l'intégrale (pondérée par une mesure positive  $\mu$ ) de la variance de prédiction sur le domaine expérimental :

$$\begin{aligned}I_\mu(\mathbf{F}) &= \int_{\mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) \mathbf{F}^{-1}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n) \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \mu(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ &= \text{tr} [\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}(\mu) \mathbf{F}^{-1}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}_n)],\end{aligned}$$

où  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}(\mu)$  est la matrice de terme général  $\int_{\mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}_i(\mathbf{x}) \boldsymbol{\phi}_j(\mathbf{x}) \mu(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$ . La  $I$ -optimalité correspond au cas d'une mesure constante  $\mathfrak{X}$ .

Un autre critère de qualité du prédicteur est l'erreur ponctuelle maximale du prédicteur sur le domaine. On parle alors de  $G$ -optimalité. Dans le cas des structures de modèle LP, un théorème central de Kiefer & Wolfowitz [21] établit l'équivalence entre la  $G$ -optimalité et la  $D$ -optimalité.

### THÉORÈME 1.1

Soit  $\boldsymbol{\xi}_n$  un protocole sur  $\mathbb{R}^s$  (i.e.  $\mathfrak{X} \subset \mathbb{R}^s$ ). Ces trois propositions sont équivalentes :

- (i)  $\boldsymbol{\xi}_n$  est  $D$ -optimal ;
- (ii)  $\sup_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = s\sigma_e^2/n$  ;
- (iii)  $\boldsymbol{\xi}_n$  est  $G$ -optimal.

Ce théorème permet de caractériser facilement les protocoles  $D$ -optimaux. Quand les fonctions de régression sont les monômes de degré croissant jusqu'à  $d$  sur le domaine

$\mathfrak{X} = [-1; 1]$ , on montre par exemple [6] que le protocole statistique  $D$ -optimal attribue des masses identiques égales à  $(d+1)^{-1}$  aux points  $\mathbf{x}$  solutions de

$$(1 - \mathbf{x}^2)P_d(\mathbf{x}) = 0,$$

où  $P_d$  est le polynôme dérivé du polynôme de Legendre de degré  $d$ . La propriété d'équité de répartition de la masse sur  $p$  points est une caractéristique générale des protocoles  $D$ -optimaux, qui les rend réalisables en pratique sans approximation pour  $n$  multiple de  $p$ .

Les critères classiques que nous venons de voir, fondés sur la MIF, ne permettent pas de tenir compte d'une incertitude sur la structure de modèle et d'adopter une démarche robuste. En présence d'une erreur structurelle non négligeable, ils ne sont plus adaptés, comme l'ont montré les travaux de Box & Draper [3] (cf. section 1.3.3). Il convient dans ce cas de fonder le critère d'optimalité sur un critère de performance directement lié à l'objectif de prédiction plutôt que sur la MIF. Dans la littérature de planification robuste (cf. chapitre 2), l'accent est mis sur des critères de performance de type intégrale de l'erreur quadratique de prédiction (IEQP). Certains auteurs, parmi lesquels Liu & Wiens [22], considèrent comme critère de performance l'EQM des paramètres de régression, mais les résultats obtenus ne semblent pas compatibles avec un objectif de prédiction (cf. section 2.2).

Rappelons la situation dans laquelle nous nous plaçons : celle d'un faible nombre d'expériences et d'un système dont on possède une faible connaissance a priori. Dans ces circonstances, un modèle comportemental simple de type LP paraît adapté, mais une erreur structurelle non négligeable est à craindre. Ceci motive une approche robuste. L'objectif de prédiction qui est le nôtre nous incite par ailleurs à fonder nos critères d'optimalité sur l'IEQP.

Quel que soit le critère de performance choisi, il est en revanche nécessaire de faire certaines hypothèses sur l'erreur structurelle. Le chapitre suivant donne un aperçu de la littérature en planification robuste à l'erreur structurelle, abordant divers types d'hypothèses sur l'erreur structurelle et les démarches qui en découlent.



## Chapitre 2

# Planification robuste à une incertitude sur la structure de modèle

Nous présentons dans ce chapitre une sélection de travaux qui ont inspiré les nôtres, donnant par la même occasion un aperçu rapide de l'état de l'art en planification robuste à une incertitude sur la structure de modèle. Cette sélection a été guidée par le point de vue que nous avons choisi d'adopter. En particulier, les structures de régression sont LP, et plus précisément des structures polynomiales, qui restent les plus couramment utilisées dans cette catégorie. Les bruits d'observation sont indépendants et identiquement distribués selon une loi normale centrée (de variance  $\sigma_e^2$ ), hypothèse dont la popularité dépasse largement le cadre de la planification d'expériences. Pour la même raison, l'estimateur des moindres carrés est utilisé pour estimer les paramètres de régression.

De même, le contexte applicatif occupe volontairement une place importante dans cet échantillon, puisque nous avons décidé de garder à l'esprit cet objectif final. C'est pourquoi nous avons par exemple préféré présenter les travaux de Cook & Nachtsheim [15] plutôt que ceux de Läuter, plus théoriques, qui les ont inspirés. L'application est également le fil directeur des travaux d'Allen, Yu & Schmitz [23]. Le point de vue théorique n'a cependant pas été mis à l'écart. Les travaux de Liu & Wiens [22] d'une part, et ceux de Yue & Hickernell [11] d'autre part, l'illustrent parfaitement.

Chaque section du chapitre est consacrée à l'un de ces travaux, présentant le contexte et les principaux résultats, suivis de nos commentaires.

---

## 2.1 Travaux de Cook & Nachtsheim (1982)

**Contexte.** Cook & Nachtsheim [15] se sont intéressés à la calibration d'un instrument de mesure de la densité d'uranium présente dans des barres cylindriques d'alimentation de centrale nucléaire recyclées. Comme le matériau n'est pas homogène, la densité est considérée comme une fonction de la position sur la longueur de la barre (la longueur du cylindre étant grande devant le diamètre de sa base). La densité totale est obtenue par intégration. Les données utilisées pour l'estimation sont les mesures effectives de la densité d'uranium, par voie chimique, dans des disques de fine épaisseur découpés à certaines positions de la longueur de la barre.

Il paraît difficile d'adopter un modèle phénoménologique pour ce problème, par conséquent une structure LP est utilisée. Il s'agit plus précisément d'une structure polynomiale classique. Le problème qui se pose est celui du choix de l'ordre du polynôme, en supposant a priori que celui-ci est inférieur ou égal à 6. Étant donné la nature du problème, une planification séquentielle n'est pas envisageable, et on ne peut donc pas successivement planifier une phase de choix de structure et une phase d'estimation des paramètres. L'idée utilisée par les auteurs est alors de considérer que l'ordre du polynôme est inférieur à 6, et de chercher des protocoles qui seront performants pour l'ensemble des polynômes dont le degré est compris entre 1 et 6. Plus exactement, ils reprennent l'idée des travaux de Läuter [19] qui visent à maximiser l'efficacité moyenne sur un ensemble de structures considérées comme possibles. Les protocoles recherchés sont des protocoles statistiques  $\xi$ .

**Critère.** Le critère choisi pour la performance du prédicteur est l'intégrale, pondérée par une mesure positive  $\mu$  sur  $\mathfrak{X}$ , de la variance (normalisée) de prédiction

$$I_\mu = \int_{\mathfrak{X}} \phi^\top(\mathbf{x})(\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \phi(\mathbf{x}) \, d\mu(\mathbf{x}).$$

Ce critère est un cas particulier du critère linéaire, qui considère une fonctionnelle linéaire  $L(\mathbf{D})$  de la matrice de dispersion normalisée

$$\mathbf{D} = (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1}.$$

Dans le cas général, le critère de  $\bar{L}$ -optimalité est défini, pour un ensemble  $\mathfrak{F}$  de structures possibles indicé par  $K$ , comme une somme pondérée :

$$\bar{L}(\xi) = \sum_{k \in K} \omega(k) \mathcal{E}_{L(k)}^{-1}(\xi), \quad (2.1)$$

où  $\mathcal{E}_{L(k)}^{-1}(\xi)$  est la  $L$ -inefficacité (inverse de la  $L$ -efficacité) de  $\xi$  par rapport à la  $k$ -ième structure. La pondération  $\omega$  sur  $K$  est introduite pour refléter une éventuelle connaissance a priori sur la probabilité relative de chaque structure, ou plus simplement pour privilégier certaines structures par rapport aux autres. On note qu'on retrouve la  $L$ -optimalité pour la  $k_0$ -ième structure si  $\omega(k_0) = 1$  et  $\omega(k) = 0$  pour  $k \neq k_0$ . Pour la suite de cette section, on note  $\xi_k^L$  le protocole  $L$ -optimal pour la  $k$ -ième structure.

Läuter [19] donne un théorème d'équivalence pour les protocoles  $\bar{L}$ -optimaux :

**THÉORÈME 2.1**

Soit

$$\bar{\eta}(\mathbf{x}, \xi) = \sum_{k \in K} \omega(k) \eta_k(\mathbf{x}, \xi),$$

avec

$$\eta_k(\mathbf{x}, \xi) = \frac{L(\mathbf{D}_k(\xi) \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^\top(\mathbf{x}) \mathbf{D}_k(\xi))}{L(\mathbf{D}_k(\xi_k^L))},$$

$\mathbf{D}_k$  étant la matrice de dispersion pour la  $k$ -ième structure. S'il existe au moins un protocole  $\xi$  tel que  $\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \bar{\eta}(\mathbf{x}, \xi) < \infty$ , alors les trois propositions suivantes sont équivalentes :

- (i)  $\bar{\xi}$  est  $\bar{L}$ -optimal ;
- (ii)  $\bar{\xi}$  minimise  $\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \bar{\eta}(\mathbf{x}, \xi)$  ;
- (iii)  $\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \bar{\eta}(\mathbf{x}, \bar{\xi}) = \bar{L}(\bar{\xi})$ .

Ce théorème d'équivalence permet d'utiliser pour l'optimisation un algorithme semblable à celui de Fedorov [24] et Wynn [25] pour la  $D$ -optimalité (on peut facilement définir le critère d'arrêt à partir de la proposition (iii) du théorème d'équivalence 2.1 ci-dessus) :

**ALGORITHME.**

1.  $i = 0$ . Prendre  $\xi_1$  non dégénéré (*i.e.* tel que  $(\Phi_n^\top \Phi_n)$  soit inversible).
2.  $i = i + 1$ . Déterminer  $\mathbf{x}^* = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \bar{\eta}(\mathbf{x}, \xi_i)$ .
3. Prendre  $\xi_{i+1} = (1 - \alpha_i) \xi_i + \alpha_i \xi_{\mathbf{x}^*}$ , où  $\xi_{\mathbf{x}^*}$  est le protocole ayant  $\mathbf{x}^*$  pour unique point de support.
4. Arrêter si  $\max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \bar{\eta}(\mathbf{x}, \xi_{i+1}) - \bar{L}(\xi_{i+1})$  est suffisamment petit. Sinon revenir à l'étape 2.

Les auteurs conjecturent la convergence de la suite des  $\bar{L}(\xi_i)$  vers l'optimum si la suite des  $\alpha_i$  est convergente vers 0 mais de somme infinie. Ils suggèrent de prendre par exemple une suite du type  $\alpha_i = (c + i)^{-1}$  avec  $c > 0$ .

**Protocoles.** Dans le cas simple où  $\mathfrak{X}$  est choisi comme étant l'ensemble des polynômes de degré 1 et 2, avec  $\omega(1) = 1 - \omega(2) = \gamma$ , et où  $\mu$  est la distribution uniforme sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ , il existe une solution analytique : les points de support du protocole  $\bar{L}$ -optimal sont  $-1$ ,  $0$  et  $1$  avec

$$\xi(\pm 1) = \frac{1 - \sqrt{1 - \gamma}}{2\gamma}$$

pour les extrémités du domaine, et au centre

$$\xi(0) = 1 - \frac{1 - \sqrt{1 - \gamma}}{\gamma}.$$

Pour l'application considérée, et afin d'étudier l'influence des pondérations  $\omega$  sur les qualités des protocoles  $\bar{L}$ -optimaux, quatre pondérations sur l'ensemble des structures polynomiales de degré 1 à 6 sont choisies :

- uniforme  $\omega_1 = [1, 1, 1, 1, 1, 1]$ ,
- structure la plus complexe  $\omega_2 = [0, 0, 0, 0, 0, 1]$ ,
- décroissance exponentielle  $\omega_3 = [32, 16, 8, 4, 2, 1]$ ,
- $\omega_4 = [1, 4, 16, 16, 4, 1]$ .

On note  $\xi_j^{\bar{L}}$  le protocole  $\bar{L}$ -optimal correspondant à la pondération  $\omega_j$ . On a donc en particulier  $\xi_2^{\bar{L}} = \xi_6^L$ .

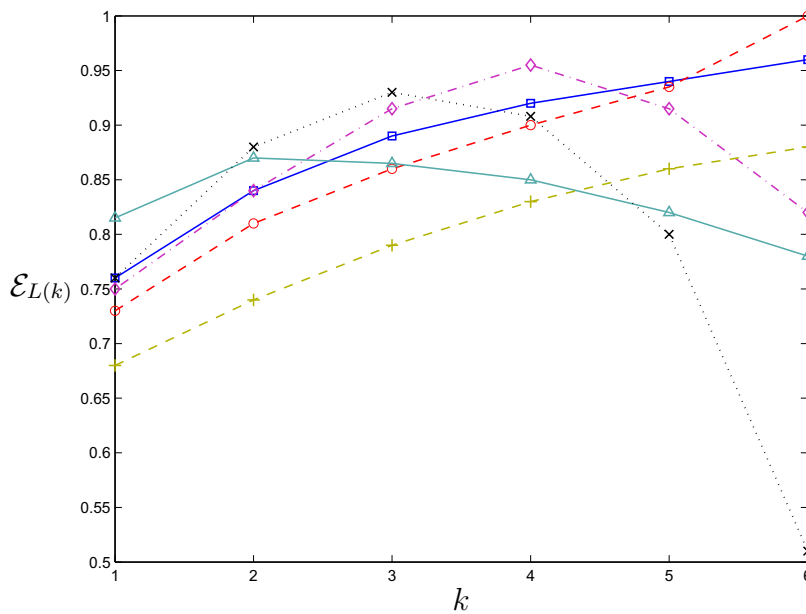


FIG. 2.1 –  $L$ -efficacités par rapport aux polynômes de degré 1 à 6 des protocoles  $\xi_1^{\bar{L}}$  (□),  $\xi_2^{\bar{L}}$  (○),  $\xi_3^{\bar{L}}$  (△),  $\xi_4^{\bar{L}}$  (◇),  $\xi_7^u$  (×) et  $\xi_{50}^u$  (+).

La figure 2.1 présente les  $L$ -efficacités par rapport aux structures polynomiales de degré 1 à 6 des protocoles  $\bar{L}$ -optimaux correspondant aux quatre pondérations, ainsi que celles des protocoles uniformément espacés  $\xi_7^u$  et  $\xi_{50}^u$  de tailles respectives  $n = 7$  et  $n = 50$ .

L'évolution des efficacités en fonction du degré du polynôme est assez différente d'un protocole à l'autre :

- Les courbes d'efficacité des protocoles  $\xi_1^{\bar{L}}$  et  $\xi_2^{\bar{L}}$  croissent de manière monotone avec le degré du polynôme, en restant proches l'une de l'autre. Le protocole  $\xi_2^{\bar{L}}$  est en fait meilleur que  $\xi_1^{\bar{L}}$  uniquement dans le cas favorable du degré 6.
- Le protocole  $\xi_{50}^u$  a également une efficacité croissante avec le degré du polynôme, mais il est moins efficace que les deux précédents dans tous les cas.
- Le protocole  $\xi_7^u$  a une efficacité maximale pour le degré 3. Pour ce cas, il est d'ailleurs le plus efficace de tous les protocoles comparés ici. En revanche, son efficacité chute pour les degrés supérieurs jusqu'à une valeur d'environ 50% pour le degré 6.
- Comme on pouvait s'y attendre vu les pondérations, le protocole  $\xi_3^{\bar{L}}$  est le plus efficace pour les polynômes d'ordre 1. Il a par ailleurs la propriété d'avoir l'efficacité

minimale la moins faible (environ 80% pour le degré 6). En revanche, son efficacité maximale est la moins grande (inférieure à 90% pour le degré 2).

- Le protocole  $\xi_4^{\bar{L}}$  atteint son efficacité maximale pour le degré 4 (près de 95%). Son efficacité reste toujours supérieure à 75%.

**Commentaires.** En somme, il nous semble que la  $\bar{L}$ -optimalité est une approche intéressante pour tenir compte d'une incertitude sur la structure de modèle dans le cas où une planification séquentielle n'est pas possible, et où il n'est donc pas envisageable de sélectionner une structure. La question du choix des différentes structures possibles, et des pondérations sur celles-ci ne semble toutefois pas simple, surtout si elle ne rend pas compte d'une véritable information a priori. Dans le cas de structures emboîtées, comme les structures polynomiales illustrées ici, il apparaît qu'un a priori uniforme est un choix convenable, car le protocole obtenu reste suffisamment efficace quelle que soit la structure retenue. Mais l'avantage global sur le protocole optimal pour la structure la plus complexe n'est pas tellement grand, ce qui n'est d'ailleurs pas très étonnant, étant donné que les structures moins complexes sont par définition incluses dans la structure la plus complexe.

Finalement, nous retiendrons que dans le cas où des structures polynomiales de degré croissant sont envisagées et qu'on ne dispose pas d'une véritable information a priori concernant la probabilité de chaque structure, planifier pour la structure la plus complexe apparaît comme un choix raisonnable puisque, tout en facilitant le traitement du problème (on se contente d'une seule structure), les performances obtenues sont tout à fait convenables quelle que soit la structure retenue a posteriori.

## 2.2 Travaux de Liu & Wiens (1997)

**Hypothèses.** Les travaux théoriques de Liu & Wiens [22] portent sur les structures polynomiales avec erreur structurelle du type

$$t(x) = \sum_{j=1}^p \theta_j x^{j-1} + x^p a(x),$$

pour  $x$  dans un intervalle compact de  $\mathbb{R}$ . Par souci de clarté et pour alléger les notations, nous exposerons ici les résultats dans le cas particulier  $\mathfrak{X} = [-1, 1]$ . La fonction  $a$  est inconnue, mais plusieurs hypothèses sont faites :

1. La fonction  $a$  est continue sur  $[-1, 1]$ , et majorée en valeur absolue par  $m$  une fonction elle-même continue, paire et strictement positive pour  $x \neq 0$ .
2. La fonction  $l(z) := zm(\sqrt{z})$  est convexe pour  $z \in [0, 1]$ .

On note que ces conditions imposent que  $l(z)$  et  $m(z)$  soient majorées par  $m(1)$ . Selon les auteurs, la continuité de  $a$  en 0 assure que les paramètres  $(\theta_j)_{0 \leq j \leq p-1}$  sont bien définis.

Le prédicteur utilisé est polynomial avec estimation des paramètres de régression  $\theta$  par moindres carrés. En notant  $\mathbf{M}(\xi) = n^{-1} \Phi_n^\top \Phi_n = \int_{\mathfrak{X}} \phi(x) \phi^\top(x) d\xi(x)$  la matrice des

moments du protocole statistique  $\xi$  et

$$\mathbf{b}(\xi, a) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi(x_i) x_i^p a(x_i) = \int_{\mathfrak{X}} \phi(x) x^p a(x) d\xi(x), \quad (2.2)$$

le biais et la matrice de covariance des paramètres estimés s'écrivent

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left\{ \hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta} \right\} &= \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\xi, a) \\ \text{cov } \hat{\boldsymbol{\theta}} &= \frac{\sigma_e^2}{n} \mathbf{M}^{-1}(\xi). \end{aligned}$$

Le déterminant de la matrice d'erreur quadratique moyenne de  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$  est donné par

$$\det [\text{EQM}(\xi, a)] = \left( \frac{\sigma_e^2}{n} \right)^p \left[ 1 + \frac{n}{\sigma_e^2} \mathbf{b}^\top(\xi, a) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\xi, a) \right] \det [\mathbf{M}^{-1}(\xi)].$$

**Critères.** Les auteurs définissent alors trois critères :

(BV) *Variance bornée.* Minimiser le « biais » maximal (sur l'ensemble  $\mathfrak{A}$  des fonctions  $a$  qui vérifient les hypothèses) à « variance » de  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$  bornée, soit :

$$\text{Minimiser } \sup_{a \in \mathfrak{A}} \mathbf{b}^\top(\xi, a) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\xi, a) \text{ sous la contrainte } \det [\mathbf{M}(\xi)] \geq c^2, \quad (2.3)$$

pour une certaine constante  $c$ .

(BB) *Biais borné.* Minimiser la variance à biais borné, soit :

$$\text{Maximiser } \det [\mathbf{M}(\xi)] \text{ sous la contrainte } \sup_{a \in \mathfrak{A}} \mathbf{b}^\top(\xi, a) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\xi, a) \leq k^2, \quad (2.4)$$

pour une certaine constante  $k$ .

(M) *Erreur minimax.* Minimiser l'EQM maximale, soit :

$$\text{Minimiser } \sup_{a \in \mathfrak{A}} \det [\text{EQM}(\xi, a)]. \quad (2.5)$$

Avec les hypothèses faites sur  $a$ , les auteurs montrent que l'EQM atteint sa borne supérieure sur l'ensemble considéré, et donnent explicitement en fonction de  $m$  la fonction  $a^+$  pour laquelle la borne est atteinte, selon plusieurs cas. Si par exemple  $m(0)$  et  $\det [\mathbf{M}(\xi)]$  sont strictement positifs, on a simplement  $a^+ = m$ . Par souci de clarté, nous nous placerons dans ce cas pour la suite de la section.

En notant  $T(\xi) = \mathbf{b}^\top(\xi, a^+) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\xi, a^+)$ , on peut finalement reformuler les problèmes (2.3), (2.4) et (2.5) comme suit :

(BV)  $\xi^{\text{BV}}(c) = \arg \min_{\xi} \{ T(\xi) : \det [\mathbf{M}(\xi)] \geq c^2 \};$

(BB)  $\xi^{\text{BB}}(k) = \arg \max_{\xi} \{ \det [\mathbf{M}(\xi)] : T(\xi) \leq k^2 \};$

(M)  $\xi^{\mathbf{M}} = \xi^{\mathbf{BB}}(k^*)$ , avec

$$\begin{aligned} k^* &= \arg \min_k \det [\text{EQM}(\xi^{\mathbf{BB}}(k), a^+)] \\ &= \arg \min_k \left( \frac{\sigma_e^2}{n} \right)^p \left[ 1 + \frac{n}{\sigma_e^2} T(\xi^{\mathbf{BB}}(k)) \right] \det [\mathbf{M}^{-1}(\xi^{\mathbf{BB}}(k))]. \end{aligned}$$

Les principaux résultats sont présentés pour les protocoles **BB**-optimaux. On montre d'abord que  $T(\xi^{\mathbf{BB}}(k))$  atteint la borne  $k^2$ , tant que  $k$  est suffisamment petit pour que  $\xi^{\mathbf{BB}}(k)$  ne puisse être la solution du problème sans contrainte. Dans le cas contraire,  $\xi^{\mathbf{BB}}(k)$  est le protocole  $D$ -optimal (par définition, voir le critère (2.4)) et par conséquent la valeur de  $T(\xi^{\mathbf{BB}}(k)) = T(\xi_D)$ , qu'on note  $k_D^2$ , ne dépend pas de  $k$ . Les protocoles  $D$ -optimaux étant à  $p$  points de support, il paraît naturel de conjecturer que cette propriété est vérifiée par les protocoles **BB**-optimaux en général. Le théorème central 2.2 ci-dessous donne des conditions sous lesquelles c'est bien le cas. La conjecture reste ouverte pour le cas général.

Quelques définitions préalables sont nécessaires. Soit  $\nu_j(\xi)$  le moment d'ordre  $2j$  du protocole  $\xi$  :  $\nu_j = \mathbb{E}_\xi \{X^{2j}\}$ ,  $X$  étant une variable aléatoire de distribution de probabilité  $\xi$ . On note  $\Xi(\nu_{p-2})$  l'ensemble des protocoles symétriques dont les moments pairs sont fixés jusqu'à l'ordre  $2(p-2)$  par le vecteur  $\nu_{p-2}$ , et  $\Xi(\nu_{p-2}, k)$  le sous-ensemble de ces protocoles qui vérifient par ailleurs la contrainte sur le biais  $T(\xi) \leq k^2$ . On dit qu'un vecteur  $\nu_{p-2}$  est **BB-admissible** si  $k^2$  est encadré par les valeurs extrêmes de  $T(\xi)$  sur l'ensemble  $\Xi(\nu_{p-2})$  :

$$\min_{\Xi(\nu_{p-2})} T(\xi) \leq k^2 \leq \max_{\Xi(\nu_{p-2})} T(\xi),$$

La solution du problème (**BB**) est à chercher dans les ensembles  $\Xi(\nu_{p-2}, k)$  pour lesquels  $\nu_{p-2}$  est **BB-admissible**.

### THÉORÈME 2.2

(i) Soit  $k^2 < k_D^2$ . On suppose que, pour tout  $\nu_{p-2}$  **BB-admissible**, il existe un protocole  $\xi_{\nu_{p-2}, k} \in \Xi(\nu_{p-2}, k)$  à  $p$  points de support et vérifiant

$$\mathbb{E}_{\xi_{\nu_{p-2}, k}} \{X^{2(p-1)}\} = \max_{\Xi(\nu_{p-2})} \mathbb{E}_\xi \{X^{2(p-1)}\}. \quad (2.6)$$

Alors la solution au problème (**BB**) est  $\xi^{\mathbf{BB}}(k) = \xi_{\nu_{p-2}^*, k}$ , où

$$\nu_{p-2}^* = \arg \max \{ \det [\mathbf{M}(\xi_{\nu_{p-2}, k})] : \nu_{p-2} \text{ est } \mathbf{BB}\text{-admissible} \}. \quad (2.7)$$

(ii) Si  $k^2 < k_D^2$  et  $m$  constante, alors il existe  $\xi_{\nu_{p-2}, k} \in \Xi(\nu_{p-2}, k)$  à  $p$  points de support et vérifiant (2.6).

(iii) Si  $k^2 \geq k_D^2$ , alors  $\xi^{\mathbf{BB}}(k) = \xi_D$ .

L'intérêt des protocoles à  $p$  points de support est que, pour  $\xi$  un tel protocole, la fonction  $T(\xi)$  peut être interprétée comme le moment d'ordre deux de la majoration de l'erreur structurale :

$$T(\xi) = \mathbb{E}_\xi \{ (X^p m(X))^2 \}. \quad (2.8)$$

Sous les conditions du premier point du théorème central ci-dessus, on a vu par ailleurs que pour un protocole **BB**-optimal,  $T(\xi^{\mathbf{BB}}(k)) = k^2$ . On obtient donc une équation que doit vérifier  $\xi^{\mathbf{BB}}(k)$ .

À  $\nu_{p-2}$  fixé, la condition d'appartenance à  $\Xi(\nu_{p-2}, k)$  impose les valeurs des  $p - 1$  premiers moments pairs, ce qui constitue  $p - 1$  équations supplémentaires. On obtient donc finalement  $p$  équations, qui permettent de déterminer complètement le protocole  $\xi_{\nu_{p-2}, k}$  correspondant. En effet, puisqu'il est symétrique, il est défini par  $p$  inconnues :  $p/2$  abscisses pour les points de support et les  $p/2$  masses correspondantes si  $p$  est pair,  $(p - 1)/2$  abscisses et  $(p + 1)/2$  masses si  $p$  est impair (puisque 0 est point de support).

Le critère (2.7) permet alors d'obtenir le protocole **BB**-optimal.

**Protocoles.** Voici quelques exemples de protocoles optimaux pour les trois critères considérés. Dans le cas particulier d'une régression de degré 1 ( $p = 2$ ), les protocoles **BB**-, **BV**-, et **M**-optimaux sont donnés par :

$$\begin{aligned} \xi^{\mathbf{BB}}(k) &= \delta_{\pm x_0} & l(x_0^2) &= \min(k, 1) ; \\ \xi^{\mathbf{BV}}(c) &= \delta_{\pm c} & \text{avec} & & 0 < c \leq 1 ; \\ \xi^{\mathbf{M}} &= \delta_{\pm x_0^*} & x_0^* &= \arg \min_{x_0 \in [0,1]} \frac{1 + (n/\sigma_e^2)l^2(x_0^2)}{x_0^2}, \end{aligned}$$

où  $\delta_{\pm x} = \frac{1}{2}(\delta_x + \delta_{-x})$ . On note que les protocoles **BV**-optimaux sont indépendants de  $m$ .

La figure 2.2 présente, dans le cas où  $m$  est la fonction unité, les protocoles optimaux pour les trois critères en fonction de la valeur du paramètre correspondant (le protocole est en abscisse, le paramètre en ordonnée), c'est-à-dire  $k$  pour **BB**,  $c$  pour **BV** et  $\sigma_e^2/n$  pour **M**. On limite la valeur de ce paramètre à 1, les protocoles optimaux pour une valeur supérieure étant tous égaux à  $\delta_{\pm 1}$ .

**Commentaires.** Ces travaux de Liu & Wiens illustrent parfaitement les limites des apports théoriques en planification robuste.

L'approche proposée est typique : à partir d'hypothèses sur l'erreur structurelle et du choix de critères de performance, les développements théoriques donnent des conditions d'optimalité, qui aboutissent à une méthode simplifiée de calcul des protocoles. Dans le cas présent, l'utilisation du théorème 2.2 n'est pas des plus aisées dès que  $p > 2$  (se reporter à l'article pour plus de détails).

Le choix des critères semble naturel. Pourtant, fondés sur le déterminant de la matrice d'erreur quadratique moyenne sur les paramètres, ils n'apparaissent pas directement liés à un objectif de prédiction. Le réglage des hyperparamètres peut alors sembler délicat, voire arbitraire. Pour les critères **BB** et **BV**, comment choisir de façon rationnelle les constantes  $k$  et  $c$  de majoration ? La question est d'ailleurs critique, quand on voit l'influence de ces paramètres sur le protocole optimal (voir la figure 2.2). De ce point de vue, le critère **M** paraît plus justifié, puisqu'il ne nécessite que la connaissance de la variance du bruit.

On peut aussi se poser la question de la pertinence des hypothèses sur  $a$ . En effet, la continuité de  $a$  en 0 assure que les paramètres de régression sont bien définis, mais impose

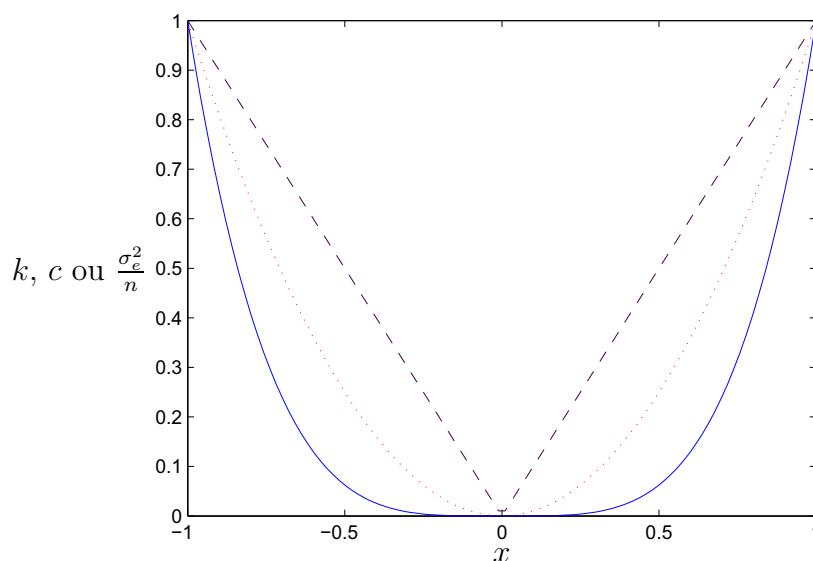


FIG. 2.2 – Variations des protocoles optimaux pour  $p = 2$  et  $m \equiv 1$  suivant la valeur du paramètre correspondant : (pointillés) **BB**-optimal suivant  $k$ , (tirets) **BV**-optimal suivant  $c$ , (continu) **M**-optimal suivant  $\sigma_e^2/n$ .

également que l'erreur structurelle  $x^p a(\mathbf{x})$  soit nulle en  $\mathbf{x} = 0$ . Cette contrainte nous semble peu pertinente du point de vue de la prédiction ; on comprend bien pourquoi sur les exemples de protocoles **M**-optimaux (fig. 2.2) : quand la variance du bruit tend vers 0, le protocole **M**-optimal tend vers le protocole  $\{0, 0\}$ . Au-delà du problème que cela engendre vis-à-vis de l'estimation des deux paramètres de régression, l'erreur de prédiction obtenue sera vraisemblablement loin d'être minimale. Il suffit pour s'en convaincre de revenir à l'exemple de la section 1.3.3, qui est un cas particulier de l'exemple ci-dessus ( $p = 2$ ).

## 2.3 Travaux de Allen, Yu & Schmitz (2003)

**Contexte.** Les travaux d'Allen, Yu & Schmitz [23] concernent la conception d'une machine à coulée sous pression pour la fabrication de pièces en aluminium. Plus précisément, dans le but d'optimiser le compromis entre le coût de fabrication de la machine et la qualité des pièces produites, l'objectif est de développer un modèle empirique de prédiction de la déformation des pièces produites (c'est-à-dire l'écart par rapport à la valeur nominale des dimensions d'une pièce) à partir de trois facteurs de dimensionnement de la machine :

- la section des traverses,
- la position des traverses par rapport au moule,
- l'épaisseur du plateau sur lequel est fixé le moule.

Pour ce faire, les auteurs s'appuient sur un modèle aux éléments finis. Bien que ces modèles soient totalement déterministes, ils considèrent tout de même un bruit, estimant que les expériences ne sont pas parfaitement reproductibles à cause des erreurs humaines se

produisant lors de la préparation des simulations et de l'analyse des résultats.

L'important coût calculatoire du code a par ailleurs obligé à limiter à 11 le nombre d'expériences réalisables (empêchant numériquement l'utilisation de plans factoriels classiquement utilisés dans ce genre de situation).

La structure utilisée est LP, avec une erreur structurelle elle-même LP :

$$t(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} + \mathbf{z}^\top(\mathbf{x})\bar{\boldsymbol{\theta}}, \quad (2.9)$$

$\bar{\boldsymbol{\theta}}$  étant le vecteur des paramètres non estimés, de taille  $q \times 1$ .

**Critère.** Les auteurs définissent directement un critère d'optimalité pour les protocoles, dans un formalisme probabiliste, en considérant l'espérance totale de l'erreur quadratique de prédiction, qu'ils nomment **EIMSE** (pour *Expected Integrated Mean Squared Error*) :

$$\text{EIMSE} = \mathbb{E}_{t,\mathbf{x},e} \left\{ [\hat{t}(\mathbf{x}, e, t, \boldsymbol{\xi}) - t(\mathbf{x})]^2 \right\}.$$

Le nom vient du fait qu'il s'agit, dans le cas courant où la loi de  $\mathbf{x}$  est la loi uniforme sur  $\mathcal{X}$ , de l'espérance (sur la loi de  $t$  induite par un a priori sur  $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ ) de l'intégrale (par rapport à  $\mathbf{x}$ ) de l'erreur quadratique moyenne (sur la loi du bruit  $e$ ) de prédiction. Pour un modèle tel que (2.9), avec un a priori gaussien centré sur les paramètres non estimés  $\bar{\boldsymbol{\theta}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{q \times 1}, \boldsymbol{\Sigma})$ , l'EIMSE s'écrit

$$\text{EIMSE} = \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] + \text{tr} [\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{H}], \quad (2.10)$$

$\mathbf{H}$  étant la matrice de taille  $p \times q$  définie par

$$\mathbf{H} = \mathbf{A}^\top \mathbf{I}_{\phi\phi} \mathbf{A} - \mathbf{I}_{\phi z}^\top \mathbf{A} - \mathbf{A}^\top \mathbf{I}_{\phi z} + \mathbf{I}_{zz}$$

avec

$$\mathbf{A} = (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{Z}_n,$$

où  $\mathbf{Z}_n$  est la matrice de modèle pour l'erreur structurelle.

Le critère (2.10) est la somme de deux termes :

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right], \\ \text{EB} &= \text{tr} [\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{H}]. \end{aligned}$$

L'**IV** (pour *Integrated Variance* ou *Intégrale de la Variance*) est l'intégrale, sur le domaine expérimental, de la variance de prédiction et correspond au critère classique de *I*-optimalité. Ce terme est la contribution du bruit dans l'erreur de prédiction et ne dépend pas de l'erreur structurelle. L'**EB** est ce qui est appelé par les auteurs *Expected Bias* et correspond à la contribution de l'erreur structurelle.

**Analyse de sensibilité.** Pour l'application,  $t$  est supposé être un modèle polynomial complet de degré 3 (sur un domaine de dimension 3), tandis que le modèle de régression est un modèle polynomial complet de degré 2. Avec ces hypothèses, il reste à spécifier la matrice  $\Sigma$  de covariance a priori des paramètres non estimés  $\bar{\theta}$ . À défaut d'information a priori suffisante, on réalise une analyse de sensibilité.

L'analyse de sensibilité est une procédure typique en planification d'expériences pour régler ce genre de problèmes. Elle consiste à étudier l'évolution des performances du protocole optimal — pour une certaine valeur des hyperparamètres —, lorsque la « vraie » valeur — celle pour laquelle on calcule la performance — de ces hyperparamètres diffère de celle utilisée pour l'optimisation. L'objectif est de trouver un protocole peu sensible aux hyperparamètres, qui restera par conséquent performant pour un éventail assez large de valeurs « vraies » des hyperparamètres.

Dans la situation présente, il s'agit d'étudier la perte de performance du protocole optimal pour une matrice de covariance  $\Sigma$  des paramètres  $\bar{\theta}$  quand la « vraie » matrice vaut  $\Sigma_0$ .

- Cette étude comporte deux étapes qui correspondent à deux caractéristiques de  $\Sigma_0$  :
- la moyenne arithmétique des variances des paramètres  $\bar{\theta}$  :  $\text{tr } \Sigma_0/q$ ,
  - les corrélations entre ces paramètres.

Plus formellement, on définit le réel positif  $\gamma$  par

$$\gamma^2 = \frac{\text{tr } \Sigma}{q\sigma_e^2}.$$

La matrice  $\Sigma$  s'écrit alors dans le cas particulier d'un a priori iid

$$\Sigma = \gamma^2 \sigma_e^2 \mathbf{I}_q.$$

En définissant de manière semblable le réel positif  $\gamma_0$  et la matrice semi-définie positive  $\mathbf{S}$  par

$$\gamma_0^2 = \frac{\text{tr } \Sigma_0}{q\sigma_e^2}, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{\gamma_0^2 \sigma_e^2} \Sigma_0,$$

on va étudier dans un premier temps les effets de  $\gamma_0 \neq \gamma$  à  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$  fixée, puis dans un deuxième temps l'influence de  $\mathbf{S} \neq \mathbf{I}_q$ .

Les paramètres  $\gamma^2$  et  $\gamma_0^2$  représentent l'importance relative de l'erreur structurelle vis-à-vis du bruit, en ce sens qu'ils sont le rapport entre la variance moyenne de  $\bar{\theta}$  et la variance du bruit. Pour l'application considérée ici, où l'on modélise la sortie d'un code aux éléments finis totalement déterministe, il est naturel de penser que le bruit est faible par rapport à l'erreur structurelle, c'est-à-dire que  $\gamma_0$  est plutôt grand. En ce sens, les auteurs proposent de considérer un  $\gamma$  égal à 2. L'analyse de sensibilité révèle que le protocole EIMSE-optimal correspondant reste très performant pour  $\gamma_0 > 1.5$ . Ils retiennent également le protocole correspondant à  $\gamma = 0.4$  qui correspond au cas où l'EB est égal à l'IV, hypothèse qui peut paraître naturelle à défaut de connaissance a priori suffisamment pertinente. Il s'avère pour sa part être performant pour les faibles valeurs de  $\gamma_0$  jusqu'à 1.

L'hypothèse choisie  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$  reflète le point de vue selon lequel il n'y a pas a priori de raisons particulières de supposer une quelconque corrélation entre les paramètres non

estimés, ni une quelconque différence entre leurs variances. Avec la même intention de traiter de manière égale ces différents paramètres, le raisonnement selon lequel leurs effets sur la valeur de l'EB doivent être égaux paraît également envisageable mais aboutit à un a priori différent sur  $\mathbf{S}$  (voir [26]). Cette réflexion suffit à justifier l'analyse de sensibilité pour  $\mathbf{S} \neq \mathbf{I}_q$ .

Pour cette étude, les auteurs se concentrent sur l'EB puisque l'IV ne dépend pas de  $\Sigma$ . Il est possible de définir un biais pire-cas sur l'ensemble  $\Omega$  des matrices  $\mathbf{S}$  d'ordre  $q$  semi-définies positives telles que  $\text{tr } \mathbf{S} = q$  :

$$\text{EB}_M(\xi, \gamma_0) = \max_{\mathbf{S} \in \Omega} \gamma_0^2 \text{tr} [\mathbf{S}\mathbf{H}].$$

L'idée est de comparer ce biais pire-cas au biais obtenu si  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ , pour divers protocoles :

- 20 protocoles aléatoires, dont les points sont tirés selon la loi uniforme sur  $\mathcal{X}$ ,
- 20 protocoles de type hypercubes latins, décrits dans [27],
- les deux protocoles EIMSE-optimaux sélectionnés précédemment ( $\gamma = 0.4$  et  $\gamma = 2$ ),
- un protocole  $D$ -optimal.

Les résultats obtenus tendent à montrer que le biais pire-cas est, pour presque tous les protocoles, environ dix fois plus important que le biais pour  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ . La conséquence remarquable de ceci est que le classement des protocoles en fonction du biais pire-cas est quasiment le même que celui en fonction du biais  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ . L'hypothèse  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$  semble donc aussi pertinente du point de vue de la robustesse que le choix d'un critère de type pire-cas, tout en étant plus économique en temps de calcul. Le protocole le plus performant pour les deux critères est l'EIMSE-optimal pour  $\gamma = 2$ , tandis que celui pour  $\gamma = 0.4$  est le troisième meilleur pour le pire cas et le cinquième sous l'hypothèse  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ .

Afin de comparer avec d'autres a priori spécifiques sur  $\Sigma$ , les auteurs prennent ensuite deux exemples de matrice  $\mathbf{S}$  pour lesquels les biais sont calculés :

$$\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} 5 & -4 & 0 & \cdots & 0 \\ -4 & 5 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}_2 = \mathbf{1}_{q \times q}$$

On note que  $\mathbf{S}_2$  correspond à un a priori de forte corrélation entre les paramètres  $\bar{\theta}$ .

Pour les 43 protocoles utilisés précédemment, l'analyse révèle que le classement des protocoles est cette fois-ci différent, selon l'hypothèse considérée  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ ,  $\mathbf{S}_1$  ou  $\mathbf{S}_2$ . En revanche, le protocole EIMSE-optimal pour  $\gamma = 2$  reste le meilleur dans tous les cas, tandis que celui pour  $\gamma = 0.4$  est le deuxième meilleur pour  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1$  mais n'est pas parmi les meilleurs si  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_2$ .

Ce qui ressort de cette analyse de sensibilité est que lorsque l'information a priori est insuffisante, prendre une matrice de covariance a priori  $\Sigma$  proportionnelle à  $\mathbf{I}_q$  est un choix vraisemblablement pertinent, en ce sens que les protocoles optimaux correspondants sont robustes à une mauvaise spécification de cet a priori : ils gardent une bonne performance si

$\mathbf{S} \neq \mathbf{I}_q$ . Ces protocoles auraient en particulier une bonne performance — relativement aux autres protocoles — même dans la situation la plus désavantageuse, puisque le biais pire-cas  $\text{EB}_M(\boldsymbol{\xi})$  évolue globalement dans le même sens que le biais sous l'hypothèse  $\mathbf{S} = \mathbf{I}_q$ .

La comparaison des performances sous d'autres hypothèses sur  $\mathbf{S}$ , et en particulier dans la situation contraire où les paramètres  $\bar{\boldsymbol{\theta}}$  sont fortement corrélés entre eux, met en avant le très bon comportement du protocole EIMSE-optimal pour  $\gamma = 2$  sous des hypothèses très variées, faisant de lui un choix particulièrement bon. Le choix de  $\gamma$  peut toutefois être modulé par les intentions de l'expérimentateur. Le choix  $\gamma = 0.4$ , qui, comparativement, privilégie la minimisation de l'IV par rapport à l'EB, est recommandée dans l'éventualité où celui-ci souhaite garder une variance plus faible de l'estimation.

**Commentaires.** L'approche proposée ici par Allen, Yu & Schmitz est intéressante de par la formulation totalement probabiliste d'un critère fondé sur l'erreur de prédiction. Cela permet de spécifier un a priori probabiliste sur l'erreur structurelle, ce qui donne une flexibilité certaine pour l'introduction d'information a priori. Dans le cas où cette information est insuffisante, cette possibilité devient en revanche une difficulté. L'analyse de sensibilité réalisée en conséquence montre que pour l'a priori  $\boldsymbol{\Sigma} = 4\sigma_e^2 \mathbf{I}_q$ , le protocole EIMSE-optimal obtenu reste très performant quand l'a priori est mal spécifié. Il serait injuste de ne pas concéder ce point mais il est plus difficile d'être convaincu qu'il ne pourrait y avoir un meilleur choix, en particulier pour la valeur de  $\gamma$ . Dans le même ordre d'idée, la décomposition de l'analyse de sensibilité en deux étapes paraît naturelle dans un but de simplification, mais d'un point de vue optimisation, on peut se demander si une sélection simultanée des variances des paramètres  $\bar{\boldsymbol{\theta}}$  et de leurs corrélations ne pourraient donner un meilleur résultat.

## 2.4 Travaux de Yue & Hickernell (1999)

**Hypothèses.** Yue & Hickernell [11] considèrent une structure LP avec erreur structurelle :

$$t(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} + r(\mathbf{x}), \quad (2.11)$$

défini sur un domaine expérimental  $\mathfrak{X} \subset \mathbb{R}^s$ . Les bruits d'observation sont iid, d'espérance nulle et de variance  $\sigma_e^2$ . Les protocoles recherchés sont des protocoles exacts  $\boldsymbol{\xi}_n$ .

L'erreur structurelle est supposée appartenir à un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS)  $\mathfrak{r}$  de noyau  $K$  et de produit scalaire  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ . Le noyau reproduisant est une fonction  $K(\cdot, \cdot)$  définie sur  $\mathfrak{X}^2$  telle que pour tout  $\mathbf{w}$  dans  $\mathfrak{X}$ , la fonction  $K(\cdot, \mathbf{w})$  appartient à  $\mathfrak{r}$  et vérifie

$$r'(\mathbf{w}) = \langle r'(\cdot), K(\cdot, \mathbf{w}) \rangle, \quad \forall r' \in \mathfrak{r}, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathfrak{X}. \quad (2.12)$$

Afin de garantir l'identifiabilité des paramètres de régression  $\boldsymbol{\theta}$  [9], l'hypothèse suivante est faite :

$$\int_{\mathfrak{X}} \phi_i(\mathbf{x})r(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0, \quad 1 \leq i \leq p. \quad (2.13)$$

Dans la suite du document, nous appellerons cette hypothèse la **condition d'orthogonalité**. La relation (2.13) ci-dessus signifie en effet que l'erreur structurale est orthogonale, au sens de la norme  $\mathcal{L}_2(\mathcal{X})$ , à l'espace vectoriel engendré par les fonctions de régression. On peut interpréter cette orthogonalité en définissant les paramètres de régression  $\boldsymbol{\theta}$  comme l'argument du minimum de la norme  $\mathcal{L}_2(\mathcal{X})$  de l'erreur structurale :

$$\boldsymbol{\theta} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}_0} \int_{\mathcal{X}} (t(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}_0)^2 d\mathbf{x}.$$

**Critère.** Le critère de performance du prédicteur considéré, pour une erreur structurale donnée, est l'intégrale d'une erreur en moyenne quadratique, qui n'est pas à strictement parler l'erreur de prédiction, mais qui s'en approche. Il s'agit en effet de la différence entre le prédicteur  $\hat{t}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\theta}}$  et la projection orthogonale  $t_\perp(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}$  de la cible  $t$  sur l'espace de régression :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\boldsymbol{\xi}_n, r) &= \int_{\mathcal{X}} \mathbb{E}_e \left\{ (\boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\theta}} - t_\perp(\mathbf{x}))^2 \right\} d\mathbf{x} \\ &= \sigma_e^2 \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi}(\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] + \mathbf{r}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi}(\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{r}_n. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Le théorème 2.3 ci-dessous donne alors une borne supérieure pour cette performance sur l'ensemble  $\boldsymbol{\tau}$  des erreurs structurales possibles. Cette borne est atteinte pour une fonction  $W$  explicitée dans le théorème.

**THÉORÈME 2.3** *Soit le modèle (2.11). L'ensemble des erreurs structurales considérées est supposé être un RKHS  $\boldsymbol{\tau}$ , dont le noyau est noté  $K(\cdot, \cdot)$ , et dont les éléments  $r$  vérifient la condition d'orthogonalité (2.13). Soit  $\mathbf{k}_n(\cdot)$  le vecteur des fonctions  $K(\cdot, \mathbf{x}_i)$ ,  $1 \leq i \leq n$ , et  $\mathbf{K}_n$  la matrice de terme général  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ . On définit*

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I}_{\phi\phi}^{1/2}(\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{1/2}.$$

Alors

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{\xi}_n, r) \leq \sigma_e^2 \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi}(\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] + \Lambda_{\max}(\mathbf{Q}) \|r^2\|_{\boldsymbol{\tau}}, \quad (2.15)$$

où  $\Lambda_{\max}(\mathbf{Q})$  est la valeur propre maximale de  $\mathbf{Q}$ . On note  $\mathbf{v}_{\max}(\mathbf{Q})$  le vecteur propre (normé) correspondant, et

$$W(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_{\max}(\mathbf{Q}) \mathbf{I}_{\phi\phi}^{1/2}(\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{k}_n(\mathbf{x}).$$

Alors, l'égalité dans (2.15) est atteinte pour les fonctions  $r$  proportionnelles à  $W$ .

Le critère d'optimalité à minimiser retenu ici est la borne supérieure donnée par l'équation (2.15). C'est un critère de type pire-cas, en ce sens que l'on cherche à minimiser l'erreur  $\mathcal{P}$  (en espérance) dans le cas le plus défavorable où  $r$  est proportionnelle à la fonction  $W$ , qui est naturellement appelée « biais pire-cas ».

On retrouve l'IV comme premier terme dans l'expression de ce critère, et par conséquent le second terme est ici aussi appelé TB. L'IV dépend de  $\sigma_e^2$  tandis que le TB dépend

de  $\|r^2\|_{\mathfrak{r}}$ , mais en divisant la somme par  $\sigma_e^2 + \|r^2\|$ , on obtient finalement un critère d'optimalité qui ne dépend plus que d'un paramètre  $\alpha$  :

$$\mathcal{Y}(\boldsymbol{\xi}_n, \alpha) = (1 - \alpha) \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] + \alpha \Lambda_{\max}(\mathbf{Q}), \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\|r^2\|_{\mathfrak{r}}}{\|r^2\|_{\mathfrak{r}} + \sigma_e^2}.$$

Le nouveau paramètre  $\alpha$  représente l'importance relative de l'erreur structurelle vis-à-vis du bruit. Quand  $\alpha$  tend vers 0, la norme de  $r^2$  devient négligeable devant la variance du bruit, et on retrouve bien le critère de  $I$ -optimalité. À l'autre extrême, quand  $\alpha$  tend vers 1, c'est la variance du bruit qui devient négligeable devant la norme de  $r^2$ , et le critère  $\mathcal{Y}$  est dominé par le TB. Ces remarques amènent les auteurs à parler de protocole « tout-biais » pour les protocoles minimisant  $\mathcal{Y}(\boldsymbol{\xi}_n, 1)$  et de protocole « tout-variance » pour les protocoles minimisant  $\mathcal{Y}(\boldsymbol{\xi}_n, 0)$ . Les protocoles tout-variance sont donc des protocoles  $I$ -optimaux. Un protocole minimisant  $\mathcal{Y}(\boldsymbol{\xi}_n, \alpha)$  pour un  $\alpha$  intermédiaire est appelé protocole « composite ».

Ce critère d'optimalité peut être étendu aux protocoles continus  $\xi$ . En introduisant de manière similaire à la matrice des moments

$$\mathbf{M} = \int_{\mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \equiv n^{-1} (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)$$

la matrice

$$\mathbf{P} = \int_{\mathfrak{X}^2} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}') \, d\xi(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}') \equiv n^{-2} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n \boldsymbol{\Phi}_n,$$

on peut écrire

$$\mathcal{Y}(\xi, \alpha) = (1 - \alpha) \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} \mathbf{M}^{-1} \right] + \alpha \Lambda_{\max}(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{P}).$$

Le TB s'annule dans ce cas pour le protocole continu  $\xi_{\mathfrak{X}}^u$  uniforme sur  $\mathfrak{X}$ , qui est donc le protocole tout-biais. On peut alors imaginer les protocoles composites comme une sorte de compromis entre les deux extrêmes : le protocole tout-variance  $I$ -optimal à  $p$  points de support, et le protocole tout-biais uniforme  $\xi_{\mathfrak{X}}^u$  à support infini. Bien que l'on recherche des protocoles exacts, il peut être intéressant de garder cette image à l'esprit, notamment vis-à-vis des répétitions : les protocoles tout-biais vont avoir tendance à éviter les répétitions, au contraire des protocoles tout-variance. Selon la valeur de  $\alpha$ , on peut imaginer que les protocoles composites auront cette tendance à un degré plus ou moins élevé.

À partir d'un choix de RKHS  $\mathfrak{t}$  pour la cible  $t$ , il est possible de calculer le noyau reproduisant de l'espace correspondant  $\mathfrak{r}$  pour l'erreur structurelle  $r$  vérifiant la condition d'orthogonalité (2.13). Le théorème 2.4 suivant donne la formule reliant les deux noyaux.

**THÉORÈME 2.4** *Soit  $\mathfrak{t}$  un espace de Hilbert à noyau reproduisant, de noyau  $K_0$  avec  $\int_{\mathfrak{X}} K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} < \infty$ , tel que  $\mathfrak{t}$  soit la somme vectorielle directe de l'espace  $\mathfrak{r}$  et de l'espace vectoriel engendré par les fonctions  $\phi_i$  :*

$$\mathfrak{t} = \operatorname{vect}\{\phi_1, \dots, \phi_p\} \oplus \mathfrak{r}. \quad (2.16)$$

La condition d'orthogonalité est vérifiée :

$$\int_{\mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) r(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \mathbf{0}_{p \times 1}, \quad \forall r \in \mathfrak{r}.$$

On note  $\mathbf{I}_{\phi K_0}$  le vecteur des  $p$  fonctions  $\int_{\mathfrak{X}} \phi_i(\mathbf{x}) K_0(\mathbf{x}, \cdot) \, d\mathbf{x}$ , et  $\mathbf{I}_{\phi K_0 \phi}^{(2)}$  la matrice de terme général  $\iint_{\mathfrak{X}^2} \phi_i(\mathbf{x}') K_0(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \phi_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}' \, d\mathbf{x}$ . Alors

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \mathbf{I}_{\phi K_0}^\top(\mathbf{x}) \left( \mathbf{I}_{\phi K_0 \phi}^{(2)} \right)^{-1} \mathbf{I}_{\phi K_0}(\mathbf{x}') \quad (2.17)$$

est le noyau correspondant au sous-espace  $\mathfrak{r}$ .

Ce théorème permet de faire des hypothèses directement sur la cible, comme l'illustre les exemples présentés ci-après.

**Protocoles.** Dans ces exemples, le protocole expérimental est le cube unité dans  $\mathbb{R}^s$  :  $[0; 1]^s$ . Les composantes d'un point  $\mathbf{x}$  dans cet espace sont notées  $x_{\{i\}}$ ,  $1 \leq i \leq s$ .

L'hypothèse faite sur la cible est une hypothèse de régularité : les fonctions partielles  $t_i(x_{\{i\}})$  sont absolument continues sur  $[0; 1]$ . Muni d'une norme idoine, l'ensemble de fonctions correspondant est un RKHS connu (voir [28], section 10.2) ayant pour noyau (partiel)

$$\tilde{K}_0(x_{\{i\}}, w_{\{i\}}) = 1 + B_1(x_{\{i\}})B_1(w_{\{i\}}) + \frac{1}{2}B_2(|x_{\{i\}} - w_{\{i\}}|),$$

où  $|x|$  est la partie fractionnaire de  $x$ ,  $|x| = x - E(x)$ , et

$$B_1(x) = x - \frac{1}{2}$$

$$B_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}$$

sont les polynômes de Bernoulli. Le noyau reproduisant de l'espace  $\mathfrak{t}$  est donné par le produit des noyaux partiels :

$$K_0(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \prod_{k=1}^s \tilde{K}_0(x_{\{k\}}, w_{\{k\}}).$$

Le noyau reproduisant de  $\mathfrak{r}$  est alors donné par (2.17).

Dans le cas le plus simple d'une régression de degré 0, on obtient :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \prod_{k=1}^s \left[ 1 + B_1(x_{\{k\}})B_1(w_{\{k\}}) + \frac{1}{2}B_2(|x_{\{k\}} - w_{\{k\}}|) \right] - 1.$$

L'IV vaut  $\sigma_e^2/n$  et ne dépend pas de  $\boldsymbol{\xi}_n$ , et la valeur propre  $\Lambda_{\max}(\mathbf{Q})$  s'écrit

$$\Lambda_{\max}(\mathbf{Q}) = -1 + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{k=1}^s \left[ 1 + B_1(x_{i\{k\}})B_1(x_{j\{k\}}) + \frac{1}{2}B_2(|x_{i\{k\}} - x_{j\{k\}}|) \right]$$

ce qui donne dans le cas unidimensionnel

$$\Lambda_{\max}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{12n^2} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( x_{[i]} - \frac{2i-1}{2n} \right)^2,$$

où les  $x_{[i]}$  sont les statistiques d'ordre des  $x_i$  :  $x_{[1]} \leq \dots \leq x_{[n]}$ . On a donc une solution analytique évidente en dimension 1 pour le protocole tout-biais (qui est aussi ici le protocole composite pour  $\alpha > 0$ ) :

$$\xi_n^{\mathcal{Y}} = \left\{ \frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \dots, \frac{2n-1}{2n} \right\}. \quad (2.18)$$

Il s'agit d'un protocole particulier. Ses points de support sont repartis uniformément sur le domaine, la distance entre deux points successifs étant constante à  $n^{-1}$ . Les deux points extrêmes de ce protocole sont par ailleurs écartés des bornes de l'intervalle d'une distance  $(2n)^{-1}$ . Ce protocole se retrouve dans la littérature : c'est le protocole optimal au sens de la distance minimax de Johnson & al. [10] et au sens de la discrédance minimale de Hickernell & Liu [9] quand  $t$  est supposée avoir une dérivée de carré intégrable.

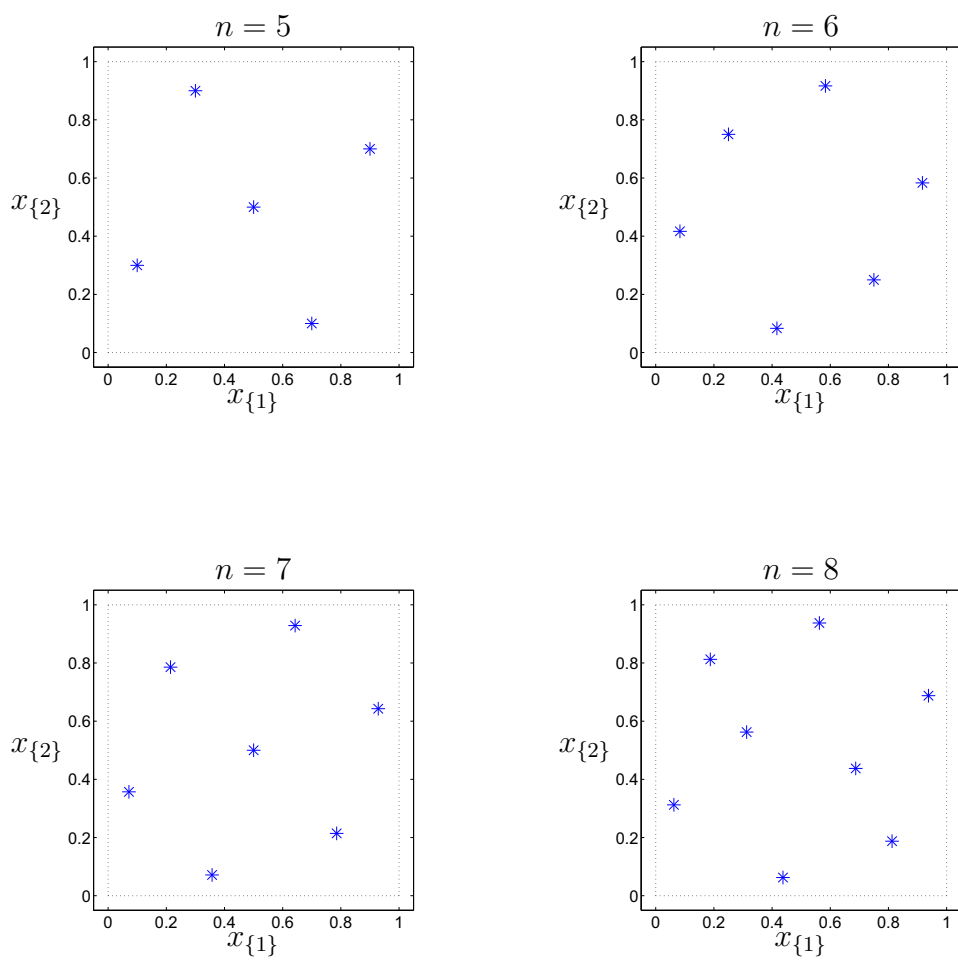
En dimension supérieure, il n'y a en revanche pas de solution analytique. Les résultats d'optimisation numérique obtenus amènent les auteurs à considérer la famille suivante de protocoles :

$$\Xi^e(n, s) = \left\{ \xi_n^e : (x_{1\{k\}}, \dots, x_{n\{k\}}) \text{ est une permutation de } \left( \frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \dots, \frac{2n-1}{2n} \right), \right. \\ \left. 1 \leq k \leq s \right\}.$$

En minimisant le critère  $\mathcal{Y}$  parmi cette famille, on obtient des protocoles géométriquement très proches des optimaux. L'équation (2.18) montre que c'est effectivement le cas pour  $s = 1$ . La figure 2.3 présente les protocoles correspondants pour  $s = 2$ .

Dans le cas des régressions de degré 1 et 2, les protocoles tout-biais conservent leur tendance à répartir leurs  $n$  points de support de manière plutôt uniforme sur le domaine expérimental, les points extrêmes étant toujours à une certaine distance des bornes de l'intervalle. Quand  $\alpha$  diminue, le nombre de points de support diminue également jusqu'à atteindre  $p$  (à condition bien sûr que  $n > p$ ) quand  $\alpha$  est suffisamment proche de 0, ce qui est en accord avec l'idée née de l'extension aux protocoles continus.

Afin de comparer les protocoles tout-biais aux protocoles tout-variance, les auteurs s'intéressent à leurs efficacités respectives en fonction de  $\alpha$ . La conclusion est que dans tous les cas étudiés (différentes valeurs de  $s$ ,  $d$  et  $n$ ), l'efficacité des protocoles tout-biais est globalement meilleure. Bien sûr, pour  $\alpha$  suffisamment proche de 0, le protocole tout-variance a une meilleure efficacité que le protocole tout-biais, mais dans la situation opposée où  $\alpha$  est proche de 1, la différence d'efficacité en faveur du protocole tout-biais est bien supérieure. Autrement dit, un protocole tout-biais garde une efficacité correcte même si l'erreur structurelle est relativement faible, tandis que l'efficacité d'un protocole

FIG. 2.3 – Protocoles  $\xi_n^e$  pour  $5 \leq n \leq 8$ .

tout-variance chute quand l'erreur structurelle devient importante. Ceci est d'autant plus vrai que la dimension du domaine expérimental augmente.

En plus de justifier l'approche robuste, ce résultat incite les auteurs à proposer l'utilisation des protocoles tout-biais dans le cas général et notamment quand l'erreur structurelle est grande.

**Commentaires.** En résumé, tout en restant d'interprétation simple, l'approche proposée par Yue & Hickernell est séduisante. En prenant comme critère de performance la norme  $\mathcal{L}_2$  de l'erreur de prédiction, l'objectif de prédiction est pris en compte directement, bien qu'il faille noter que l'erreur de prédiction est ici définie non pas pour la cible elle-même mais pour sa projection orthogonale sur l'espace de régression. Le choix d'un RKHS comme espace de représentation pour l'erreur structurelle est original et utile puisqu'il permet d'obtenir un critère d'optimalité de type pire-cas vis-à-vis de celle-ci, ce qui est intéressant du point de vue de la robustesse. Il est de plus possible avec ce type de représentation de prendre en compte, par le choix du noyau reproduisant, un large éventail d'information a priori sur la cible. La spécification de l'hyperparamètre  $\alpha$ , défini à partir de la variance du bruit et de la norme de l'erreur structurelle dans le RKHS, ne pose pas de difficulté à partir d'une connaissance a priori même vague de l'importance relative du bruit et de l'erreur structurelle. Dans le cas où ce type d'information n'est pas présent, les auteurs suggèrent d'utiliser le protocole tout-biais ( $\alpha = 1$ ) parce qu'il est globalement plus performant que le protocole tout-variance, ce qui peut être vu comme une analyse de sensibilité assez sommaire, dont il est difficile de se contenter.

## 2.5 Conclusion

Nous avons pu voir au travers de ces divers articles différentes approches de la problématique de planification d'expériences dans le cas où la structure de régression est incertaine, ce qui est courant dans la situation où celui-ci est LP et ne traduit pas une connaissance suffisante du système qui génère les observations.

Cook & Nachtsheim caractérisent cette incertitude par plusieurs choix possibles pour la structure utilisée. Dans ce cas, l'objectif est d'obtenir un protocole qui soit suffisamment performant pour l'ensemble des structures pris en compte. Les résultats obtenus nous ont permis de constater que, dans le cas de structures emboîtées, ne tenir compte que de la structure la plus complexe donnait un protocole suffisamment efficace sur l'ensemble des structures pour justifier une telle simplification.

Les trois autres travaux sont fondés sur une stratégie plus courante, qui consiste à caractériser l'incertitude par une erreur structurelle entre la structure de régression et la fonction cible. Les différents travaux se distinguent alors par les hypothèses faites sur cette erreur structurelle, et la façon de les formaliser.

Allen, Yu & Schmitz envisagent des erreurs structurelles elles-mêmes LP, ce qui leur permet d'avoir une formulation totalement probabiliste pour un critère fondé sur l'erreur de prédiction, que nous avons trouvé particulièrement séduisante, car offrant de vastes

possibilités pour l'introduction de connaissances a priori.

Pour Yue & Hickernell, l'erreur structurelle est un élément d'un RKHS à spécifier. Cette formulation est intéressante car elle leur permet de définir un critère d'optimalité au sens minimax vis-à-vis de l'erreur structurelle. Le potentiel offert pour l'introduction de connaissances a priori est ici encore plus grand dans le sens où il est possible, au travers du choix du noyau reproduisant, de prendre en compte des erreurs structurelles de types variés (dont en particulier les structures LP, cf. [16]). Le formalisme probabiliste n'est toutefois présent qu'indirectement.

Les hypothèses de Liu & Wiens sont reportées sur une fonction majorant l'erreur structurelle en valeur absolue. Malgré l'intérêt de cette démarche, il nous semble que le contexte théorique nécessite certaines hypothèses trop fortes, qui limitent en particulier la capacité d'introduction de connaissance a priori. Les critères développés sont également peu satisfaisants de notre point de vue dans le sens où le lien avec la prédiction n'est pas direct : contrairement aux autres travaux, ils ne sont pas fondés sur un critère de type intégral et considèrent une erreur sur les paramètres de régression plutôt que directement sur la prédiction, contrairement aux conclusions des travaux fondateurs de Box & Draper [3], et à la tendance générale dans le domaine de l'estimation de fonctions.

Dans toutes ces approches apparaît le problème des hyperparamètres qui est général en planification d'expériences. Cook & Nachtsheim se retrouvent face au choix des pondérations  $\omega(k)$  pour les différentes structures de régression possibles. Dans les trois autres travaux, on est confronté à plusieurs variantes du compromis biais-variance. Chez Liu & Wiens, les constantes de majoration  $k$  pour le biais et  $c$  pour la variance en sont d'une certaine manière une facette. Le choix de la fonction de majoration peut lui aussi être vu comme un élément de ce compromis de par son influence sur l'importance relative de l'erreur structurelle vis-à-vis du bruit. Chez Allen, Yu & Schmitz d'une part et chez Yue & Hickernell d'autre part, le compromis biais-variance est explicite au travers de la forme mathématique du critère, composé de la somme de l'IV et d'un terme de biais. Les paramètres, respectivement  $\gamma$  et  $\alpha$ , caractérisent l'importance du terme de biais par rapport à l'IV.

Pour résoudre le problème des hyperparamètres, Allen, Yu & Schmitz réalisent une analyse de sensibilité, démarche classique et somme toute naturelle mais peu satisfaisante dans ce qu'elle a d'arbitraire. Yue & Hickernell choisissent eux le raccourci de l'opposition entre le tout-biais et le tout-variance, qui demeure une simplification. Ce constat nous a conduits à nous demander s'il était possible dans une démarche plus approfondie de traiter le problème des hyperparamètres de façon plus rationnelle, et nous a amenés à développer le critère maximin que présentons en section 3.5.

## Chapitre 3

# Nouveaux critères pour la planification robuste à une erreur structurelle

Ce chapitre présente les deux nouveaux critères développés, fondés sur une modélisation de l'erreur structurelle par un processus stochastique, gaussien ou plus généralement qui possède un moment d'ordre deux.

Après un rappel des hypothèses, les expressions mathématiques générales des critères sont établies. Nous étudions ensuite les protocoles optimaux obtenus dans le cas particulier de la régression polynomiale et d'une gaussienne pour fonction de covariance du processus, et analysons leurs variations en fonction des valeurs des hyperparamètres. Le problème délicat de la suppression de la dépendance des protocoles optimaux envers ces hyperparamètres sera alors abordé, avec l'utilisation d'un critère de type maximin de l'efficacité. Nous terminons ce chapitre par la comparaison de l'efficacité des protocoles obtenus à celle de protocoles issus de méthodes relevées dans la littérature.

---

### 3.1 Rappel des hypothèses

On cherche à estimer une grandeur d'intérêt  $t$ , appelée cible, scalaire et à valeurs réelles, à partir de la connaissance de la valeur d'une ou plusieurs grandeurs  $(x_{\{i\}})_{1 \leq i \leq s}$ , appelées entrées, qui forment le vecteur  $\mathbf{x}$ . L'ensemble des valeurs que peut prendre  $\mathbf{x}$ , appelé domaine expérimental, est noté  $\mathfrak{X}$  et supposé être un compact de  $\mathbb{R}^s$ .

**Modèle.** Pour l'estimation de  $t$ , on choisit d'utiliser une structure de modèle LP à  $p$  paramètres, mais on la considère incertaine du fait de l'insuffisance des connaissances a priori. Cette incertitude est représentée par une erreur structurelle notée  $r$  qui s'ajoute au modèle de régression :

$$\begin{aligned} t(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^p \theta_i \phi_i(\mathbf{x}) + r(\mathbf{x}) \\ &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) \boldsymbol{\theta} + r(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.1)$$

où les  $\phi_i$  sont les fonctions de régression.

**Hypothèse d'observation.** Afin de recueillir les données nécessaires à l'estimation, on envisage de réaliser une unique série d'expériences  $\{(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathfrak{X} \times \mathbb{R}, 1 \leq i \leq n\}$ , les  $y_i$  étant des observations bruitées des  $t_i = t(\mathbf{x}_i)$  :

$$y_i = t_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

On suppose classiquement que les bruits d'observation  $e_i$  sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées selon une loi normale centrée de variance  $\sigma_e^2$ . En adoptant une notation vectorielle, on a donc

$$\mathbf{e}_n \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{n \times 1}, \sigma_e^2 \mathbf{I}_n).$$

**Estimation des paramètres.** L'estimation des paramètres de régression  $\boldsymbol{\theta}$  est réalisée par la méthode des moindres carrés :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_{MC} = (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{y}_n,$$

où  $\boldsymbol{\Phi}_n$  est la matrice de régression, de taille  $n \times p$ , dont la  $i$ -ème ligne est  $\boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}_i)$ , et  $\mathbf{y}_n$  est le vecteur des observations, de taille  $n \times 1$ .

Nous verrons par la suite (section 3.3.4) qu'une légère modification des critères d'optimalité obtenus permet de considérer une estimation par moindres carrés pondérés (MCP). Par souci de clarté et de concision, nous ferons dans un premier temps les développements pour le cas des moindres carrés standards.

**Critère de performance du prédicteur.** Le critère de performance est fondé sur l'erreur d'estimation  $\hat{t}(\mathbf{x}) - t(\mathbf{x})$ , ce qui nous paraît naturel dans le contexte de la prédiction, et plus spécifiquement sur la norme  $\mathcal{L}_2$  de cette erreur, soit l'intégrale de l'erreur quadratique de prédiction (IEQP) :

$$\text{IEQP} = \int_{\mathbf{x}} (\hat{t} - t)^2. \quad (3.2)$$

Ce choix est motivé par le fait que l'emploi d'un critère du type « intégrale de l'erreur quadratique » est le plus courant dans la littérature de planification robuste à l'erreur structurelle (cf. chapitre 2) depuis l'article fondateur de Box & Draper [3]. Nous verrons à la section 3.3.4 que les critères d'optimalité obtenus peuvent être étendus à d'autres critères de performance.

À partir de ces hypothèses, nous allons « construire » nos critères d'optimalité. La première étape de cette construction est le calcul de l'IEQP.

## 3.2 Calcul de l'IEQP

On développe le prédicteur :

$$\begin{aligned} \hat{t}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})(\boldsymbol{\Phi}_n^\top\boldsymbol{\Phi}_n)^{-1}\boldsymbol{\Phi}_n^\top\mathbf{y}_n \\ &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})(\boldsymbol{\Phi}_n^\top\boldsymbol{\Phi}_n)^{-1}\boldsymbol{\Phi}_n^\top(\boldsymbol{\Phi}_n\boldsymbol{\theta} + \mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n) \\ &= \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\psi}^\top(\mathbf{x})(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n), \end{aligned}$$

où  $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x})$  est défini comme en (1.3). En utilisant (3.1), on obtient l'erreur de prédiction :

$$\hat{t}(\mathbf{x}) - t(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\psi}^\top(\mathbf{x})(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n) - r(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

On obtient une formule de l'IEQP :

$$\text{IEQP} = (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{\psi}} (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n) - 2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r} + \int_{\mathbf{x}} r^2, \quad (3.4)$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{\psi}} &= \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \\ \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r} &= \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}r}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

où les matrices  $\mathbf{I}_{\cdot}$  sont les matrices des intégrales des produits de fonctions, par exemple :  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} = \int_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})\boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ .

Pour définir sans ambiguïté les paramètres  $\boldsymbol{\theta}$ , la condition (2.13) d'orthogonalité (cf. section 2.4) impose que  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}r}$  soit le vecteur nul. Par conséquent  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r}$  est nul également. On obtient alors :

$$\text{IEQP} = (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{\psi}} (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n) + \int_{\mathbf{x}} r^2. \quad (3.6)$$

On souhaite maintenant obtenir un critère d'optimalité, c'est-à-dire une fonction de  $\xi_n$ . On note que l'IEQP dépend :

- de la structure de modèle au travers de  $\mathbf{I}_{\psi\psi}$ ,
- de l'erreur de modèle au travers de  $r$  et  $\mathbf{r}_n$ ,
- des réalisations du bruit  $\mathbf{e}_n$ ,
- du protocole  $\xi_n$  au travers de  $\mathbf{r}_n$  et  $\mathbf{I}_{\psi\psi}$ .

En supposant la structure de modèle choisie a priori, il reste à se défaire de la dépendance vis-à-vis du bruit et de l'erreur structurelle. Nous avons vu dans l'état de l'art au chapitre précédent différentes manières d'aborder la question. La dépendance à l'égard du bruit est, de manière naturelle et usuelle, supprimée en prenant l'espérance. La façon de spécifier l'erreur structurelle est en revanche ce qui différencie les différentes approches. Nous avons décidé de traiter conjointement le bruit et l'erreur structurelle dans un formalisme probabiliste, de façon similaire à Allen, Yu & Schmitz [23] (section 2.3), car cela permet de caractériser statistiquement l'erreur de prédiction dans son ensemble.

L'originalité de notre travail repose sur le fait que nous choisissons une représentation par processus gaussien (pas nécessairement stationnaire) pour l'erreur de modèle :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_r \{r(\mathbf{x})\} &= 0, & \forall \mathbf{x} \in \mathfrak{X} ; \\ \mathbb{E}_r \{r(\mathbf{x})r(\mathbf{x}')\} &= c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), & \forall (\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathfrak{X}^2. \end{aligned}$$

Il s'agit donc d'une généralisation de l'approche d'Allen, Yu & Schmitz, qui correspond au cas particulier où la fonction de covariance du processus s'écrit  $c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{z}^\top(\mathbf{x})\Sigma\mathbf{z}(\mathbf{x}')$ , pour un vecteur  $\mathbf{z}(\cdot)$  de fonctions définies sur  $\mathfrak{X}$  et  $\Sigma$  une matrice symétrique définie positive.

Notre approche s'apparente également à celle de Yue et Hickernell [11] (section 2.4) dans le sens où l'analogie entre les espaces de Hilbert à noyaux reproduisants (RKHS) et les ensembles de trajectoires de processus gaussiens est établie. En quelques mots, on peut identifier l'ensemble des trajectoires d'un processus gaussien de moyenne nulle et de fonction de covariance  $c$ , et le RKHS dont le noyau est  $c$ . Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à Kimeldorf & Wahba [29].

Cependant, les notions probabilistes qui peuvent être définies avec le formalisme des processus gaussiens ne trouvent pas toutes leur équivalent dans le formalisme des RKHS, or c'est précisément ce qui nous intéresse ici : de manière semblable à l'approche EIMSE, on pourra en effet prendre comme critère d'optimalité l'espérance totale de l'IEQP (section 3.3.1), ou dans un esprit plus novateur, un quantile de l'IEQP (section 3.3.2).

Avec une telle représentation de l'erreur structurelle, on pourrait envisager une régression par krigeage (voir par exemple [17]). Nous avons toutefois fait le choix, qui reste courant en planification d'expériences (cf. chapitre 2), d'une estimation paramétrique linéaire par rapport aux paramètres.

### 3.3 Critères d'optimalité

#### 3.3.1 Espérance totale de l'IEQP (ETIEQP)

Comme chez Allen, Yu & Schmitz [23] (section 2.3), la représentation probabiliste de l'erreur structurelle permet de prendre l'espérance totale, conjointement sur le bruit et l'erreur structurelle, de l'IEQP (3.6) :

$$\mathbb{E}_{r,e} \{ \text{IEQP} \} = \text{tr} [\mathbf{I}_{\psi\psi} \mathbf{C}_n^{\text{tot}}] + \mathbb{E}_{r,e} \left\{ \int_{\mathbf{x}} r^2 \right\},$$

où  $\mathbf{C}_n^{\text{tot}} = \mathbb{E} \{ (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \}$  est la matrice de covariance globale. Il paraît par ailleurs naturel de supposer que le bruit et l'erreur de modèle sont indépendants. On a donc :

$$\mathbb{E}_{r,e} \left\{ \int_{\mathbf{x}} r^2 \right\} = \mathbb{E}_r \left\{ \int_{\mathbf{x}} r^2 \right\} = \int_{\mathbf{x}} \mathbb{E}_r \{ r^2 \} = \int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

et

$$\mathbf{C}_n^{\text{tot}} = \mathbf{C}_n + \sigma_e^2 \mathbf{I}_n,$$

où  $\mathbf{C}_n$  est la matrice de covariance des  $r(\mathbf{x}_i)$ , de terme général  $c(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ . Avec (3.5) :

$$\begin{aligned} \text{tr} [\mathbf{I}_{\psi\psi} \mathbf{C}_n^{\text{tot}}] &= \text{tr} \left[ \Phi_n (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top \mathbf{C}_n^{\text{tot}} \right] \\ &= \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \Phi_n (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top \right] \\ &\quad + \text{tr} \left[ \Phi_n (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top \mathbf{C}_n \right] \\ &= \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \right] + \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top \mathbf{C}_n \Phi_n (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \right]. \end{aligned}$$

Finalement, on obtient :

$$\begin{aligned} \text{ETIEQP} &= \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \right] \\ &\quad + \int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top \mathbf{C}_n \Phi_n (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

On reconnaît l'IV (section 2.3) dans le premier terme de cette expression, seul terme non nul dans le cas où l'erreur structurelle est identiquement nulle. Le critère ETIEQP est donc équivalent au critère de  $I$ -optimalité dans ce cas. Il faut noter que l'appellation peut prêter à confusion ici, au sens que l'IV n'est pas l'intégrale de la variance totale de prédiction (qui est l'IEQP), mais l'intégrale de la variance de prédiction conditionnelle :

$$\int_{\mathbf{x}} \text{var}_{e|r} [\hat{t}(\mathbf{x})] d\mathbf{x} = \sigma_e^2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \right].$$

La somme des deux autres termes de (3.7) correspond alors à l'espérance, par rapport à la loi de l'erreur structurelle, de l'intégrale du carré du biais de prédiction conditionnel :

$$\text{ETIEQP} - \text{IV} = \mathbb{E}_r \left\{ \int (\mathbb{E}_{e|r} \{ \hat{t}(\mathbf{x}) \} - t(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \right\}.$$

Comme suggéré par Yue & Hickernell [11] (section 2.4), nous utiliserons par la suite la dénomination **terme de biais** pour désigner cette somme. L'expression *Expected Bias* d'Allen, Yu & Schmitz nous paraît en effet sujette à débat, puisque prise à la lettre, le « biais » considéré est en réalité l'intégrale du carré du biais de prédiction conditionnel.

La notion d'espérance est la plus évidente et la plus naturelle en probabilités. Elle caractérise un comportement « moyen ». Du point de vue de la robustesse, il est également pertinent de s'intéresser aux cas où l'on s'écarte de ce comportement moyen. À l'extrême, l'idée de la robustesse correspond à faire « au mieux » dans le « pire » des cas. C'est ce qui a motivé les travaux de Yue & Hickernell [11] (section 2.4). Le formalisme qu'ils utilisent leur permet de calculer (à un facteur multiplicatif près) le maximum de l'IEQP sur l'ensemble des erreurs de modèle considérées, en utilisant toutefois une définition de l'erreur de prédiction (2.14) légèrement différente de la nôtre. Nous avons pensé qu'il serait intéressant de se placer dans une situation intermédiaire. L'idée qui motive cette situation est celle de la « maîtrise du niveau de robustesse ». La notion probabiliste qui s'y rattache est celle de **quantile**. Le critère que nous proposons dans la section suivante est celui du quantile de l'IEQP.

### 3.3.2 Quantile de l'IEQP (QIEQP)

Le calcul d'un quantile est rarement simple. Il nécessite l'inversion de la fonction de répartition, ce qui est rarement possible analytiquement. Encore faut-il déjà avoir une expression analytique de la fonction de répartition. Dans certains cas standards, des valeurs ont été tabulées, ce qui permet une bonne approximation par interpolation. En observant la formule de l'IEQP (3.6), il ne nous a pas paru évident de retrouver un de ces cas. Nous avons cependant cherché à reformuler l'IEQP afin de dégager certaines propriétés qui pourrait aider à une approximation numérique rapide du quantile (nous avons rapidement éliminé les méthodes de Monte Carlo, compte tenu des temps de calculs trop importants pour envisager une optimisation, cf. section 4.1).

Dans la formule de l'IEQP (3.6), si on discrétise l'intégrale  $\int_{\mathbf{x}} r^2$  par  $\sum q_i^2 r(\mathbf{z}_i)^2$ , on remarque que l'IEQP peut s'écrire comme une somme de carrés de variables aléatoires conjointement gaussiennes.

En effet, puisque les  $\phi_i$  forment une base  $\mathcal{B}$  de l'espace de régression, on peut décomposer la matrice  $\mathbf{I}_{\phi\phi}$  en  $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$  ( $\mathbf{A}$  étant la matrice  $p \times p$  de passage d'une base orthonormée à  $\mathcal{B}$ ). On a alors  $\mathbf{I}_{\psi\psi} = \mathbf{U}^\top \mathbf{U}$  avec :

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}(\Phi_n^\top \Phi_n)^{-1} \Phi_n^\top.$$

L'IEQP devient :

$$\text{IEQP} \approx \sum_i q_i^2 r(\mathbf{z}_i)^2 + (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{U} (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)$$

$$\begin{aligned} \text{IEQP} &\approx \sum_i (q_i r(\mathbf{z}_i))^2 + \sum_{k=1}^p [\mathbf{U}(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)]_k^2 \\ &\triangleq \mathbf{g}^\top \mathbf{g}. \end{aligned}$$

Le vecteur  $\mathbf{g}$  ainsi défini est gaussien centré. En effet, les variables  $r(\mathbf{z}_i)$ ,  $r(\mathbf{x}_j)$  et  $e_j$  sont des variables conjointement gaussiennes et centrées. En notant  $\Delta_Q$  la matrice diagonale des pondérations  $q_i$ , on peut écrire simplement la matrice de covariance de  $\mathbf{g}$  :

$$\mathbb{E}_{r,e} \{\mathbf{g}\mathbf{g}^\top\} = \left[ \begin{array}{c|c} \Delta_Q \mathbf{C}_z \Delta_Q & \Delta_Q \mathbf{C}_{zn} \mathbf{U}^\top \\ \hline \mathbf{U} \mathbf{C}_{zn}^\top \Delta_Q & \mathbf{U} (\mathbf{C}_n + \sigma_e^2 \mathbf{I}_n) \mathbf{U}^\top \end{array} \right],$$

où  $\mathbf{C}_z$  est la matrice de covariance des  $r(\mathbf{z}_i)$  et  $\mathbf{C}_{zn}$  la matrice de terme général  $c(\mathbf{z}_i, \mathbf{x}_j)$ .

Nous avons donc dégagé une formulation assez simple de l'IEQP comme une somme de carrés de variables conjointement gaussiennes centrées, au prix d'une approximation dont on peut régler la précision (elle dépend du nombre de  $\mathbf{z}_i$ ). Nous avons développé une méthode numérique de calcul de la fonction de répartition pour ce type de variable aléatoire, ce qui permet d'en estimer les quantiles. Cette méthode sera exposée en détails au chapitre suivant (section 4.1).

### 3.3.3 Fonction de covariance et condition d'orthogonalité

La condition d'orthogonalité (2.13) a des implications sur la fonction de covariance du processus. En effet, pour que l'erreur structurale soit orthogonale aux fonctions de régression, il est nécessaire que la fonction de covariance y soit aussi orthogonale :

$$\int_{\mathfrak{X}} \phi_i(\mathbf{x}) c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x} = \mathbb{E} \left\{ r(\mathbf{x}') \int_{\mathfrak{X}} r(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\} = 0 \quad \forall \mathbf{x}' \in \mathfrak{X}. \quad (3.8)$$

Il s'agit donc d'une contrainte sur le choix de la fonction de covariance. Si on souhaite s'en libérer, par analogie avec le théorème 2.4 de Yue & Hickernell (section 2.4) sur les noyaux des RKHS, on peut obtenir, à partir d'une fonction de covariance  $c$  quelconque, la fonction de covariance  $c_\perp$  correspondant au processus orthogonal :

$$c_\perp(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \mathbf{I}_{\phi c}^\top(\mathbf{x}) \left( \mathbf{I}_{\phi c \phi}^{(2)} \right)^{-1} \mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}') \quad (3.9)$$

où  $\mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}')$  est la matrice  $p \times 1$  d'intégrales  $\int_{\mathfrak{X}} c(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  et  $\mathbf{I}_{\phi c \phi}^{(2)}$  la matrice  $p \times p$  d'intégrales doubles  $\iint_{\mathfrak{X}^2} \phi(\mathbf{x}') c(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \phi^\top(\mathbf{x}) d\mathbf{x}' d\mathbf{x}$ . Cependant, l'hypothèse (2.16) doit être vérifiée, ce qui implique que les fonctions de régression appartiennent au RKHS considéré. Cette hypothèse est une contrainte supplémentaire. Nous établissons ci-dessous une formule donnant la fonction de covariance  $c_\perp$  sans tenir compte de cette hypothèse.

Si la condition d'orthogonalité (3.8) n'est pas respectée, la fonction  $r(\cdot)$  peut être décomposée en une partie  $r_{\perp}(\cdot)$  orthogonale à l'espace de régression et une partie *dans* l'espace de régression :

$$r(\mathbf{x}) = r_{\perp}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}^{+}. \quad (3.10)$$

Les paramètres  $\boldsymbol{\theta}^{+}$  sont définis par :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}^{+} &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} \int_{\mathbf{x}} \left( r(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} \right)^2 d\mathbf{x} \\ &= \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}r} \end{aligned}$$

L'espérance du processus orthogonal est donc nulle, puisque d'après (3.10) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_r \{ r_{\perp}(\mathbf{x}) \} &= \mathbb{E}_r \{ r(\mathbf{x}) \} - \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x}) \mathbb{E}_r \{ \boldsymbol{\theta}^{+} \} \\ &= 0 - \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \mathbb{E}_r \{ \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}r} \} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Sa fonction de covariance  $c_{\perp}$  s'obtient directement en développant  $\mathbb{E} \{ r_{\perp}(\mathbf{x}) r_{\perp}(\mathbf{x}') \}$  à partir de (3.10) :

$$c_{\perp}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c}(\mathbf{x}') - \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x}') \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\phi}^{\top}(\mathbf{x}') \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c\boldsymbol{\phi}}^{(2)} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}^{-1} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}). \quad (3.11)$$

**Critère ETIEQP.** Si la fonction de covariance ne satisfait pas la condition d'orthogonalité (3.8), il faut ajouter au critère (3.7) l'espérance du terme  $-2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^{\top} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r}$  annulé dans l'IEQP (3.4) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{r,e} \{ -2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^{\top} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r} \} &= -2 \mathbb{E}_r \{ \mathbf{r}_n^{\top} \mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}r} \} \\ &= -2 \int_{\mathbf{x}} \mathbb{E}_r \{ \mathbf{r}_n^{\top} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) r(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \} \\ &= -2 \operatorname{tr} \left[ \int_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) \mathbb{E}_r \{ r(\mathbf{x}) \mathbf{r}_n^{\top} \} d\mathbf{x} \right] \\ &= -2 \operatorname{tr} \left[ \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \int_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \mathbf{c}_n^{\top}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right] \\ &= -2 \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c_n} \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

où  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c_n}$  est la matrice des intégrales  $\int_{\mathbf{x}} \phi_i(\mathbf{x}) c(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) d\mathbf{x}$ . Le critère d'optimalité complet est donc :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{r,e} \{ \text{IEQP} \} &= \int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \sigma_e^2 \operatorname{tr} \left[ \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} (\boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] \\ &\quad + \operatorname{tr} \left[ \left( \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} (\boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \mathbf{C}_n - 2 \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}c_n} \right) \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^{\top} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

On vérifie que le même résultat est obtenu en utilisant l'expression (3.11) de la covariance  $c_{\perp}$  dans le critère (3.7).

**Preuve** En effet, l'IV ne change pas puisqu'elle ne dépend pas de l'erreur structurale. Pour le terme de biais, la matrice de covariance devient :

$$\mathbf{C}_\perp = \mathbf{C}_n - \mathbf{\Phi}_n \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c_n} - \mathbf{I}_{\phi c_n}^\top \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top + \mathbf{\Phi}_n \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top, \quad (3.14)$$

d'où

$$\begin{aligned} \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{C}_\perp \mathbf{\Phi}_n (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \right] \\ = \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{C}_n \mathbf{\Phi}_n (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \right] \\ - \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c_n} \mathbf{\Phi}_n (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \right] \\ - \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{I}_{\phi c_n}^\top \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right] \\ + \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right]. \end{aligned}$$

La somme des deuxième et troisième terme du membre de droite est égale au terme (3.12) puisque

$$\text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi} (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{I}_{\phi c_n}^\top \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right] = \text{tr} \left[ (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{I}_{\phi c_n}^\top \right] = \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c_n} \mathbf{\Phi}_n (\mathbf{\Phi}_n^\top \mathbf{\Phi}_n)^{-1} \right].$$

Il reste alors à montrer que

$$\int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int_{\mathbf{x}} c_\perp(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right]. \quad (3.15)$$

À partir de (3.11), on déduit :

$$\int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int_{\mathbf{x}} c_\perp(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = 2 \int_{\mathbf{x}} \phi^\top(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int_{\mathbf{x}} \phi^\top(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Or

$$\int_{\mathbf{x}} \phi^\top(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right],$$

et

$$\int_{\mathbf{x}} \phi^\top(\mathbf{x}) \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \text{tr} \left[ \int_{\mathbf{x}} \mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}) \phi^\top(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right] = \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right]$$

car

$$\int_{\mathbf{x}} \mathbf{I}_{\phi c}(\mathbf{x}) \phi^\top(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \iint_{\mathbf{x}^2} \phi(\mathbf{x}') c(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \phi^\top(\mathbf{x}) d\mathbf{x}' d\mathbf{x}.$$

D'où le résultat. ■

L'avantage de la prise en compte de la condition d'orthogonalité (3.8) dans la fonction de covariance est théorique, puisqu'il s'agit de définir rigoureusement les paramètres  $\boldsymbol{\theta}$ . Du point de vue numérique par contre, l'utilisation de la formule (3.13) est avantageuse car le calcul de  $\mathbf{C}_\perp$  en utilisant les formules (3.9) ou (3.11) nécessite le calcul d'un nombre plus important d'intégrales, notamment la matrice  $\mathbf{I}_{\phi c\phi}^{(2)}$  d'intégrales doubles, ce qui alourdit la charge calculatoire et réduit la précision dans le cas où celles-ci sont estimées numériquement. Avec (3.9), il faut par ailleurs calculer l'inverse de cette matrice, ce qui pose problème si elle est mal conditionnée.

**Critère QIEQP.** Si la fonction de covariance ne satisfait pas la condition d'orthogonalité (3.8), la formulation du critère QIEQP comme une somme de carrés de variables conjointement gaussiennes n'est pas possible à cause du terme supplémentaire  $-2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\psi r}$  dans l'IEQP, et notre méthode numérique d'approximation du quantile n'est alors pas applicable. Il est donc nécessaire d'imposer la condition d'orthogonalité. La méthode développée (section 4.1) calcule l'IEQP à partir de la matrice de covariance de  $\mathbf{g}$ . On pourra utiliser la formule (3.14) pour le calcul de cette matrice.

### 3.3.4 Extensions à un cadre plus général

**Moindres carrés pondérés.** Comme nous l'avons évoqué en début de chapitre, notre approche peut-être employée dans le cas d'une estimation des paramètres de régression par moindres carrés pondérés (MCP) :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MCP}} = (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}_n \triangleq \boldsymbol{\Gamma}_n \mathbf{y}_n,$$

typiquement utilisée lorsque les bruits d'observation sont corrélés, de matrice de covariance a priori  $\boldsymbol{\Sigma}$ . En effet, puisque  $\boldsymbol{\Gamma}_n \boldsymbol{\Phi}_n = \mathbf{I}_n$ , on retrouve avec l'estimateur des MCP la même expression que (3.3) pour l'erreur de prédiction, avec

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\psi}_{\text{MCP}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Gamma}_n^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}),$$

et on a donc

$$\mathbf{I}_{\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{\psi}} = \boldsymbol{\Gamma}_n^\top \mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} \boldsymbol{\Gamma}_n$$

ce qui permet d'appliquer la méthode présentée en section 3.3.2 pour le calcul du quantile. L'ETIEQP s'écrit quant à elle

$$\text{ETIEQP} = \sigma_e^2 \text{tr} [\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} \boldsymbol{\Gamma}_n \boldsymbol{\Gamma}_n^\top] + \int_{\mathfrak{X}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} + \text{tr} [\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}} \boldsymbol{\Gamma}_n \mathbf{C}_n \boldsymbol{\Gamma}_n^\top].$$

**Autres critères de performance.** Il est également possible de considérer un critère de performance plus général que la simple norme  $\mathcal{L}_2$  de l'erreur d'estimation (3.2). En effet, on peut voir la matrice  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}$  comme une matrice de pondération qui reflète le critère de performance choisi. Par analogie avec l' $I_\mu$ -optimalité (cf. section 1.4) par exemple, si la précision souhaitée de la prédiction n'est pas uniforme sur tout le domaine expérimental, on peut introduire une mesure de probabilité  $\mu$  pour exprimer cette information a priori. Dans cette situation, il suffit alors de remplacer la matrice  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}$  par la matrice

$$\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}(\mu) = \int_{\mathfrak{X}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}).$$

De même, si le souhait est de pouvoir extrapoler en dehors du domaine expérimental, il suffit de modifier la matrice  $\mathbf{I}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}$  en conséquence en prenant les intégrales sur le domaine de prédiction à la place du domaine expérimental.

Dans le cas où l'on s'intéresse à une fonctionnelle linéaire de la cible, de la forme  $L(t) = \int \mu(\mathbf{x})t(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ , qu'on estime par  $\hat{L} = L(\hat{t})$ , un critère de performance naturel est l'erreur quadratique de l'estimation :

$$\begin{aligned} (\hat{L} - L)^2 &= \left( \hat{\boldsymbol{\theta}}^\top L(\boldsymbol{\phi}) + L(r) - \boldsymbol{\theta}^\top L(\boldsymbol{\phi}) \right)^2 \\ &= (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{W} (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n) - 2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{w} + L(r)^2, \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} L(\boldsymbol{\phi}) L(\boldsymbol{\phi}^\top) (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top, \\ \mathbf{w} &= \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} L(\boldsymbol{\phi}) L(r). \end{aligned}$$

On peut alors mettre l'erreur quadratique moyenne sous une forme semblable à celle de l'ETIEQP (3.13) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{r,e} \left\{ (\hat{L} - L)^2 \right\} &= \mathbb{E}_{r,e} \left\{ L(r)^2 \right\} + \sigma_e^2 \operatorname{tr} \left[ L(\boldsymbol{\phi}) L(\boldsymbol{\phi}^\top) (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] \\ &\quad + \operatorname{tr} \left[ \left( L(\boldsymbol{\phi}) L(\boldsymbol{\phi}^\top) (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{C}_n - 2L(\boldsymbol{\phi}) \mathbb{E}_{r,e} \left\{ L(r) \mathbf{r}_n^\top \right\} \right) \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Nous aurons l'occasion de présenter ce type de critère au dernier chapitre, dans le cadre de l'application de notre méthode à un instrument de débitmétrie (cf. section 5.5).

## 3.4 Protocoles optimaux

Nous avons défini deux critères d'optimalité pour des protocoles exacts. On souhaite maintenant étudier les protocoles optimaux correspondants. Pour obtenir un protocole optimal par minimisation d'un de ces critères, il nous reste à spécifier les choix pour :

- le domaine expérimental,
- la structure de modèle, *i.e.* les fonctions de régression,
- la fonction de covariance du processus gaussien modélisant l'erreur structurelle.

### 3.4.1 Spécification d'un contexte pour l'analyse des protocoles optimaux

**Structure de modèle.** L'idée directrice qui a guidé nos choix était de se placer dans des conditions classiques. La régression polynomiale gardant une place importante dans le domaine de la planification d'expériences, les structures de régression sélectionnées sont les modèles polynomiaux complets de degré  $d$ . Pour  $s = 2$  par exemple, les fonctions de régression sont

$$\boldsymbol{\phi}^\top(\mathbf{x}) = [1, x_{\{1\}}, x_{\{1\}}^2, x_{\{1\}}x_{\{2\}}, x_{\{2\}}^2, x_{\{1\}}^3, x_{\{1\}}^2x_{\{2\}}, x_{\{1\}}x_{\{2\}}^2, x_{\{2\}}^3, \dots] \quad (3.17)$$

**Fonction de covariance.** En ce qui concerne la fonction de covariance du processus gaussien, on peut la choisir stationnaire en supposant que les non-stationnarités de la cible seront « absorbées » par la régression [30]. Généralement, les fonctions de covariance utilisées pour la modélisation par processus gaussien sont des produits de fonctions unidimensionnelles. Une famille classique de fonctions de ce type est celle des exponentielles [30] :

$$c_u(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \varsigma^2 \prod_{i=1}^s \exp(-|(w^{(i)} - x^{(i)})/\lambda_i|^u), \quad (\mathbf{w}, \mathbf{x}) \in \mathfrak{X}^2,$$

pour  $0 < u \leq 2$ . Pour  $u = 2$ , les trajectoires du processus gaussien seront infiniment dérivables ; c'est la covariance que nous avons choisie, puisque la plus utilisée et recommandée ([31],[16]). Elle dépend du paramètre  $\varsigma^2$ , qui correspond à la variance du processus puisque  $\mathbb{E}_r \{r(\mathbf{x})^2\} = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \varsigma^2$ , et des paramètres  $\lambda_i$ , appelés **distances caractéristiques** ou encore **paramètres d'échelle**, que nous regroupons dans un vecteur  $\boldsymbol{\lambda}$ .

Avec cette fonction de covariance, la condition d'orthogonalité (3.8) n'est pas satisfaite, puisque la fonction  $c_2(\mathbf{x}, \cdot)$  n'est pas orthogonale aux fonctions de régression (3.17). On aura donc recours aux résultats de la section 3.3.3 pour le calcul des critères.

**Domaine expérimental.** Le domaine expérimental le plus simple et le plus courant est un intervalle de  $\mathbb{R}$ , et plus généralement un hypercube en dimension  $s > 1$  : il s'agit la plupart du temps de  $[0; 1]^s$  ou  $[-1; 1]^s$ . Pour les critères classiques et pour de nombreux autres critères (voir chapitre 2), les protocoles statistiques optimaux sont symétriques par rapport au centre de l'intervalle, du fait de la convexité des critères d'optimalité. La symétrie de  $[-1; 1]^s$  permet de mettre en relief cette symétrie, de même qu'elle peut mettre en relief la dissymétrie éventuelle. C'est pour cette raison que nous avons choisi cet intervalle. En effet, comme nous le verrons dans la section 3.4.3, certains des protocoles optimaux que nous avons obtenus ne sont pas symétriques. Par ailleurs, pour les critères classiques, les protocoles optimaux pour n'importe quel intervalle peuvent être obtenus par homothétie-translation. C'est également le cas pour nos critères, à condition de changer les paramètres  $\lambda_i$  en accord avec l'homothétie, *i.e.* le rapport entre  $\lambda_i$  et la longueur de l'intervalle dans la direction  $i$  doit rester constant.

**Preuve** En effet, prenons l'exemple du cas unidimensionnel pour plus de clarté. On se place sur un intervalle quelconque  $\mathfrak{X} = [a - b; a + b]$ . Soit  $\boldsymbol{\xi}_n$  un protocole sur  $\mathfrak{X}$  et  $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_n$  le protocole ramené sur  $\tilde{\mathfrak{X}} = [-1; 1]$  par homothétie-translation, *i.e.* on utilise le changement de variable

$$\begin{aligned} \mathfrak{X} &\longrightarrow \tilde{\mathfrak{X}} \\ \mathbf{x} &\longmapsto \tilde{\mathbf{x}} = \frac{1}{b}(\mathbf{x} - a). \end{aligned}$$

L'IEQP (3.6) devient :

$$\text{IEQP}(\mathfrak{X}, \boldsymbol{\xi}_n) = b \int_{\tilde{\mathfrak{X}}} r^2(b\tilde{\mathbf{x}} + a) d\tilde{\mathbf{x}} + (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\psi\psi}(\mathfrak{X}, \boldsymbol{\xi}_n) (\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n).$$

Un calcul simple montre que  $\mathbf{I}_{\psi\psi}(\mathfrak{X}, \boldsymbol{\xi}_n) = b\mathbf{I}_{\psi\psi}(\tilde{\mathfrak{X}}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}_n)$ , avec  $\mathbf{I}_{\psi\psi}(\tilde{\mathfrak{X}}, \tilde{\boldsymbol{\xi}}_n)$  la matrice des intégrales sur  $\tilde{\mathfrak{X}}$ . On voit donc que si le processus dilaté-translaté  $r(b\tilde{\mathbf{x}} + a)$  a la même loi

sur  $\tilde{\mathfrak{X}}$  que le processus initial sur  $\mathfrak{X}$ , le problème d'optimisation reste inchangé (puisque le critère d'optimisation est le même, au facteur multiplicatif  $b$  près). La loi du processus dilaté-translaté est donnée par :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_r \{r(b\tilde{\mathbf{x}} + a)\} &= 0, & \forall \tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{\mathfrak{X}} ; \\ \mathbb{E}_r \{r(\tilde{\mathbf{x}})r(\tilde{\mathbf{w}})\} &= \tilde{c}_u(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{w}}), & \forall (\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{w}}) \in (\tilde{\mathfrak{X}})^2,\end{aligned}$$

la fonction  $\tilde{c}_u$  étant de paramètre d'échelle  $\tilde{\lambda}$ . Donc le problème est inchangé si

$$\tilde{c}_u(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{w}}) = c_u(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = c_u(b\tilde{\mathbf{x}} + a, b\tilde{\mathbf{w}} + a),$$

ce qui équivaut à

$$\tilde{\lambda}^{-1} = \frac{b}{\lambda},$$

$\lambda$  étant le paramètre d'échelle de  $c_u$ . ■

Nous venons de spécifier un cadre précis pour l'étude des protocoles optimaux. Il reste toutefois quelques hyperparamètres à fixer avant de pouvoir passer à l'optimisation du critère. C'est l'objet de la discussion de la section suivante.

### 3.4.2 Hyperparamètres

Avec les réglages exposés ci-dessus, les protocoles ETIEQP-optimaux dépendent de cinq hyperparamètres :

- la taille  $n$  du protocole,
- le degré  $d$  du polynôme de régression,
- la variance du bruit  $\sigma_e^2$ ,
- la variance  $\zeta^2$  du processus gaussien,
- le vecteur  $\boldsymbol{\lambda}$  des distances caractéristiques pour la fonction de covariance.

Pour les protocoles QIEQP-optimaux, l'ordre  $\nu$  du quantile est un hyperparamètre supplémentaire.

On peut en fait réduire le nombre de ces hyperparamètres à quatre (cinq pour le QIEQP). De manière similaire à Yue & Hickernell (section 2.4), en introduisant le paramètre

$$\alpha = \frac{\zeta^2}{\zeta^2 + \sigma_e^2} \tag{3.18}$$

de compromis entre l'erreur due au bruit et l'erreur introduite par l'erreur structurelle, les protocoles optimaux ne dépendent en fin de compte que de  $n$ ,  $d$ ,  $\alpha$  et  $\boldsymbol{\lambda}$ .

---

**Preuve** En effet, soit  $\tilde{e} = e/\sigma_e$  et  $\tilde{r} = r/\varsigma$ , l'IEQP (3.4) s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{IEQP} &= \int_{\mathcal{X}} r^2 + \mathbf{r}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \mathbf{e}_n + 2\mathbf{r}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \mathbf{e}_n - 2(\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n)^\top \mathbf{I}_{\psi r} \\ &= \varsigma^2 \left( \int_{\mathcal{X}} \tilde{r}^2 + \tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{r}}_n - 2\tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\tilde{r}} \right) + \sigma_e^2 \tilde{\mathbf{e}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{e}}_n + 2\varsigma\sigma_e (\tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{e}}_n - \tilde{\mathbf{e}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\tilde{r}}) \\ &= (\varsigma^2 + \sigma_e^2) \left( \alpha \left( \int_{\mathcal{X}} \tilde{r}^2 + \tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{r}}_n - 2\tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\tilde{r}} \right) \right. \\ &\quad \left. + (1 - \alpha) \tilde{\mathbf{e}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{e}}_n + 2\sqrt{\alpha(1 - \alpha)} (\tilde{\mathbf{r}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\psi} \tilde{\mathbf{e}}_n - \tilde{\mathbf{e}}_n^\top \mathbf{I}_{\psi\tilde{r}}) \right) \end{aligned}$$

Pour les deux critères d'optimalité, l'espérance et le quantile de l'IEQP, le protocole optimal ne dépend donc que de la valeur du paramètre  $\alpha$ . ■

**Hypothèses.** Nous supposons que la taille du protocole est fixée a priori par l'expérimentateur, compte tenu des contraintes matérielles, et que cette taille est relativement petite, c'est-à-dire de l'ordre de l'unité à quelques dizaines. Dans le cas où ces contraintes sont du type coût de l'expérimentation, un autre problème, consistant à choisir le nombre d'expériences nécessaire pour obtenir une précision donnée sur l'estimation, pourrait être étudié.

De même, le degré du polynôme d'estimation est supposé choisi a priori. Le choix de ce paramètre peut paraître délicat, et la planification d'expériences pour un choix optimal du degré de régression polynomiale a été abordé par Dette [32]. Il s'agit d'un cas particulier de planification pour la discrimination entre structures (cf. section 1.3.2). Par ailleurs, les remarques faites sur les travaux de Cook & Nachtsheim [15] (section 2.1) nous suggèrent que planifier pour la structure la plus complexe est un choix raisonnable dans le cas d'une régression polynomiale. La taille du protocole étant fixée, la complexité de la structure de modèle est limitée (en termes de nombre de paramètres estimables). On peut par conséquent supposer, pour la phase de planification tout au moins, que le degré le plus grand possible (vis-à-vis du nombre de paramètres estimables) est sélectionné. Dans ce cas, le prédicteur est un interpolateur puisque le nombre de paramètres à estimer est égal à la taille du protocole. En dimension  $s = 1$ , on pourrait donc supposer que le degré sera choisi égal à  $n - 1$ . Ce choix peut être discutable dans le sens où il n'y alors aucune robustesse aux *outliers*. Afin de garantir un minimum de robustesse de ce point de vue, il peut être pertinent de limiter a priori le nombre de paramètres de régression à un nombre strictement inférieur à  $n$ . Dans le cas unidimensionnel, on peut imaginer choisir un degré égal à  $n - 2$  ou  $n - 3$  par exemple, étant donnée la petite taille du protocole.

L'ordre  $\nu$  du quantile est vu comme un paramètre de réglage, en ce sens qu'il s'agit d'une décision de l'expérimentateur de définir le niveau de confiance souhaité. Pour cette section, on a fixé  $\nu = 95\%$ , valeur parmi les plus répandues.

Dans un premier temps, nous supposerons également connues les distances caractéristiques de la fonction de covariance avec par ailleurs l'hypothèse d'*isotropie*, c'est-à-dire

que tous ces paramètres sont égaux :  $\boldsymbol{\lambda} = \lambda \mathbf{1}_{n \times 1}$ . De même, le paramètre de compromis  $\alpha$  sera supposé connu. Bien entendu, en pratique ces paramètres seront rarement connus lors de la phase de planification. Nous verrons alors un moyen de s'affranchir de cette hypothèse à la section 3.5.

Ces remarques étant faites, on définit finalement deux critères d'optimalité à minimiser :

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\xi}, \alpha, \lambda) = (\zeta^2 + \sigma_e^2)^{-1} \text{ETIEQP}(\boldsymbol{\xi}_n, d, \sigma_e^2, \zeta^2, \boldsymbol{\lambda}) \quad (3.19)$$

$$\mathcal{Q}(\boldsymbol{\xi}, \alpha, \lambda) = (\zeta^2 + \sigma_e^2)^{-1} \text{QIEQP}(\boldsymbol{\xi}_n, d, \sigma_e^2, \zeta^2, \boldsymbol{\lambda}, \nu = 0.95), \quad (3.20)$$

dont nous étudions les protocoles optimaux à la section suivante.

### 3.4.3 Résultats de l'optimisation

Nous présentons dans cette section des exemples de protocoles optimaux au sens des critères  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$ , ce qui nous donnera l'occasion de faire quelques commentaires. Nous notons  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}}$  et  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{Q}}$  les protocoles respectivement  $\mathcal{T}$ - et  $\mathcal{Q}$ -optimaux.

**Critère  $\mathcal{T}$ .** Les protocoles obtenus pour  $\alpha = 0$  correspondent au cas  $\zeta^2 = 0$ , *i.e.* l'erreur structurelle est nulle (négligeable devant le bruit d'observation). En particulier, ils sont indépendants de la valeur de  $\lambda$ . Ils minimisent l'IV et il s'agit donc des protocoles  $I$ -optimaux.

À l'opposé, les protocoles pour  $\alpha = 1$  correspondent au cas  $\sigma_e^2 = 0$ , *i.e.* le bruit d'observation est nul (négligeable devant l'erreur structurelle). Ils minimisent le terme de biais. En accord avec la littérature (cf. chapitre 2), nous les appelons « protocoles tout-biais », tandis que les protocoles  $I$ -optimaux sont appelés « tout-variance ».

Dans le cas le plus simple d'une régression polynomiale de degré  $d = 0$ , l'IV vaut  $2^s \sigma_e^2 / n$  et est donc indépendante du protocole. Tous les protocoles sont donc tout-variance, et les protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux ne dépendent pas de la valeur de  $\alpha$ . Si par ailleurs  $n = 1$ , le protocole optimal est  $\boldsymbol{\xi}_1 = \{\mathbf{0}_{s \times 1}\}$  (le centre du domaine) quelle que soit la valeur de  $\lambda$  (voir preuve en annexe).

À partir de  $n > 1$ , l'optimisation n'est plus possible de manière analytique, excepté pour quelques cas particuliers, et les résultats numériques que nous présentons ici ont été obtenus par une méthode d'optimisation fondée sur l'optimisation par essaim de particules. Les détails de cette méthode seront donnés au chapitre suivant (section 4.2).

Afin d'analyser l'influence de la valeur des hyperparamètres sur le protocole optimal, nous avons étudié les variations des protocoles en fonction des hyperparamètres  $\alpha$  et  $\lambda$ , à  $n$  et  $d$  fixés, conformément aux remarques faites dans la section précédente. Comme suggéré par la littérature (cf. chapitre 2), nous nous sommes spécialement intéressés au

comportement des protocoles pour les valeurs extrêmes des hyperparamètres, c'est-à-dire les protocoles tout-biais et tout-variance pour  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 0$  respectivement, ainsi qu'aux comportements asymptotiques pour  $\lambda \rightarrow 0$  et  $\lambda \rightarrow \infty$ , bien que les valeurs extrêmes de  $\lambda$  puissent paraître peu intéressantes d'un point de vue pratique, dans le sens où une distance de corrélation nulle revient à considérer l'erreur de modélisation comme un bruit blanc, tandis qu'une distance de corrélation très grande signifie que l'erreur de modélisation est aisément estimable. Nous allons revenir sur ces points à la lumière des protocoles obtenus.

La figure 3.1 présente les variations en  $\alpha$  et  $\lambda$  des protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux de taille  $n = 2$  pour un polynôme de degré  $d = 1$  sur le domaine unidimensionnel  $\mathcal{X} = [-1; 1]$ . Les étoiles représentent les points de support des protocoles, tandis que des pointillés ont été ajoutés pour représenter une pseudo-continuité de la position de ces points vis-à-vis de la valeur des paramètres  $\alpha$  et  $\lambda$  ; en aucun cas ils ne représentent un comportement avéré, mais ils servent à illustrer nos propos.

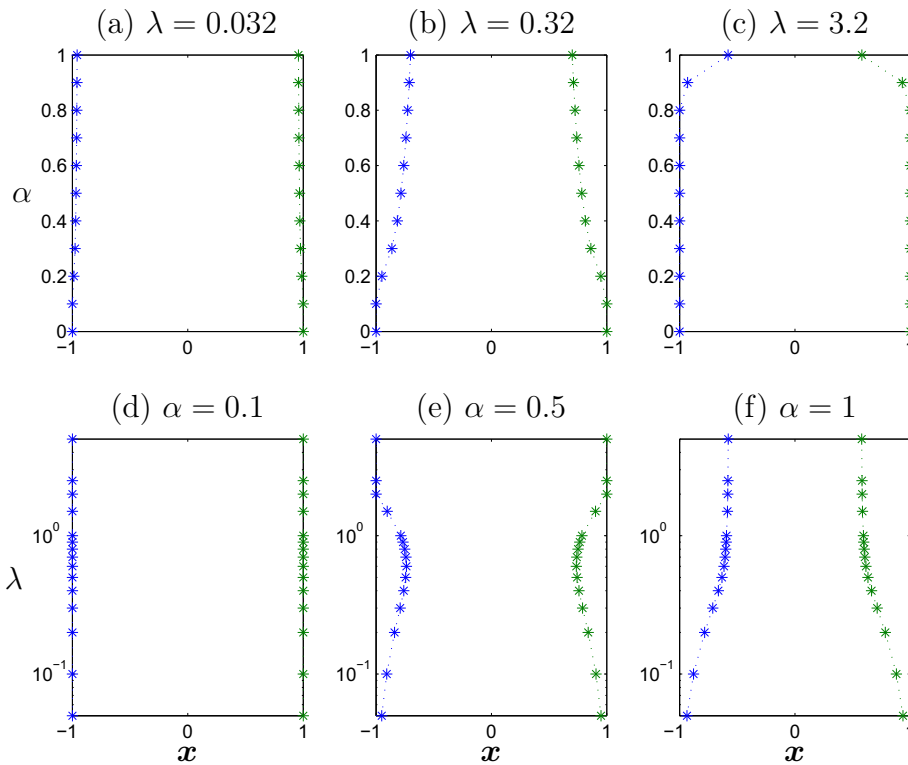


FIG. 3.1 – Protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux pour  $d = 1$ ,  $n = 2$ . (a,b,c) Variation suivant  $\alpha$  à  $\lambda$  fixé. (d,e,f) Variation suivant  $\lambda$  à  $\alpha$  fixé.

On remarque tout d'abord que le protocole tout-variance inclut les bords de l'intervalle, ce qui est normal puisqu'il s'agit du protocole  $I$ -optimal. On voit sur les courbes (a, b, c) que quand  $\alpha$  augmente à  $\lambda$  fixé, les points de support du protocole ont tendance à s'écartier des bords de l'intervalle. Ce comportement est classique pour les protocoles robustes, comme nous avons pu le voir dans le chapitre 2. On note en revanche que ce

comportement n'est pas identique pour toutes les valeurs de  $\lambda$  : l'écartement est plus ou moins rapide et prononcé en fonction de  $\alpha$ , ce que nous pouvons observer distinctement sur les courbes (d, e, f), montrant les variations en  $\lambda$  à  $\alpha$  fixé.

Plus précisément, pour chaque valeur de  $\lambda$ , il semblerait qu'on puisse définir un  $\alpha_m(\lambda)$ , tel que pour  $\alpha < \alpha_m(\lambda)$ , le protocole robuste reste le protocole tout-variance. La fonction  $\alpha_m(\lambda)$  serait une fonction rapidement croissante, avec  $\alpha_m(\lambda) > 0.9$  pour  $\lambda = 5$  (c). L'interprétation que nous avons de ce comportement est la suivante : quand  $\lambda$  augmente, l'erreur structurale  $r$  devient plus facilement approchée par un polynôme, *i.e.* la projection de  $r$  sur l'espace de régression devient de plus en plus grande en norme, relativement à la partie orthogonale  $r_\perp$ . Pour une variance  $\zeta^2$  donnée, la norme de  $r$  est fixée (en moyenne quadratique), et donc la norme de  $r_\perp$  diminue quand  $\lambda$  augmente. À  $\alpha < 1$  fixé, le rapport  $\sigma_e^2/\zeta^2$  est fixé, par conséquent le terme de biais devient de moins en moins important devant l'IV quand  $\lambda$  augmente. D'où le fait que le protocole  $\mathcal{T}$ -optimal est de plus en plus proche du protocole tout-variance.

Plus formellement, à partir de (3.15), en notant  $\eta^2$  l'espérance du carré de la norme de  $r_\perp$ , on a :

$$\begin{aligned} \eta^2 &= \mathbb{E}_r \left\{ \int_{\mathbf{x}} r_\perp^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\} = \int_{\mathbf{x}} c_\perp(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbf{x}} c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x} - \text{tr} \left[ \mathbf{I}_{\phi\phi}^{(2)} \mathbf{I}_{\phi\phi}^{-1} \right] \\ &= \zeta^2 \kappa^2(d, \lambda). \end{aligned}$$

La figure 3.2 montre les variations de  $\kappa^2(d, \lambda)$  en fonction de  $\lambda$  pour  $d < 4$ . À  $d$  fixé, la fonction  $\kappa_d^2(\lambda)$  est bien décroissante, de même que la suite des  $\kappa_\lambda^2(d)$  à  $\lambda$  fixé.

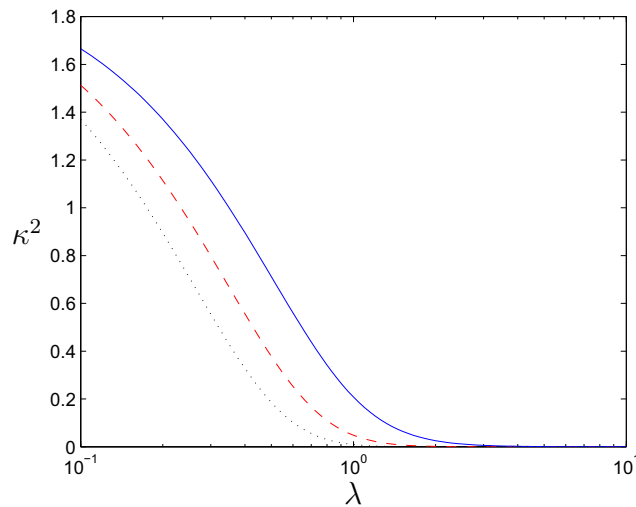


FIG. 3.2 – Évolution du paramètre  $\kappa^2(d, \lambda)$  en fonction de  $\lambda$  pour  $d = 1$  (continu),  $d = 2$  (tirets),  $d = 3$  (pointillés).

On définit alors un nouveau paramètre

$$\tilde{\alpha} = \frac{\eta^2}{\eta^2 + \sigma_e^2} \quad (3.21)$$

et on trace (figure 3.3) les variations des protocoles en fonction de  $\tilde{\alpha}$  à  $\lambda$  fixé, et en fonction de  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé.

Concernant le comportement asymptotique des protocoles pour les valeurs limites de  $\lambda$ , les courbes de la figure 3.1 suggèrent que quelle que soit la valeur de  $\alpha$ , les protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux tendent vers le protocole  $I$ -optimal lorsque  $\lambda$  tend vers 0. Ceci s'interprète assez aisément puisque l'erreur structurelle tend dans ce cas vers un bruit iid gaussien, la matrice de covariance  $\mathbf{C}_n$  tendant vers  $\zeta^2 \mathbf{I}_n$ . On retrouve alors le critère de  $I$ -optimalité pour un bruit total de variance  $\sigma_e^2 + \zeta^2$ .

Quand  $\lambda$  tend vers l'infini, il semble également que le protocole  $\mathcal{T}$ -optimal tende vers un protocole limite, avec cette fois-ci deux cas de figure : pour  $\alpha < 1$ , il s'agit une nouvelle fois du protocole  $I$ -optimal ; mais pour  $\alpha = 1$ , le protocole limite est apparemment différent. Le comportement pour  $\alpha < 1$  peut s'interpréter avec la même remarque qu'au paragraphe précédent,  $\kappa^2$  tend vers 0 quand  $\lambda$  tend vers l'infini. En observant les variations des protocoles en fonction de  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé sur la figure 3.3, on remarque que le comportement asymptotique pour  $\alpha = 1$  se retrouve pour  $\tilde{\alpha}$  quelconque fixé.

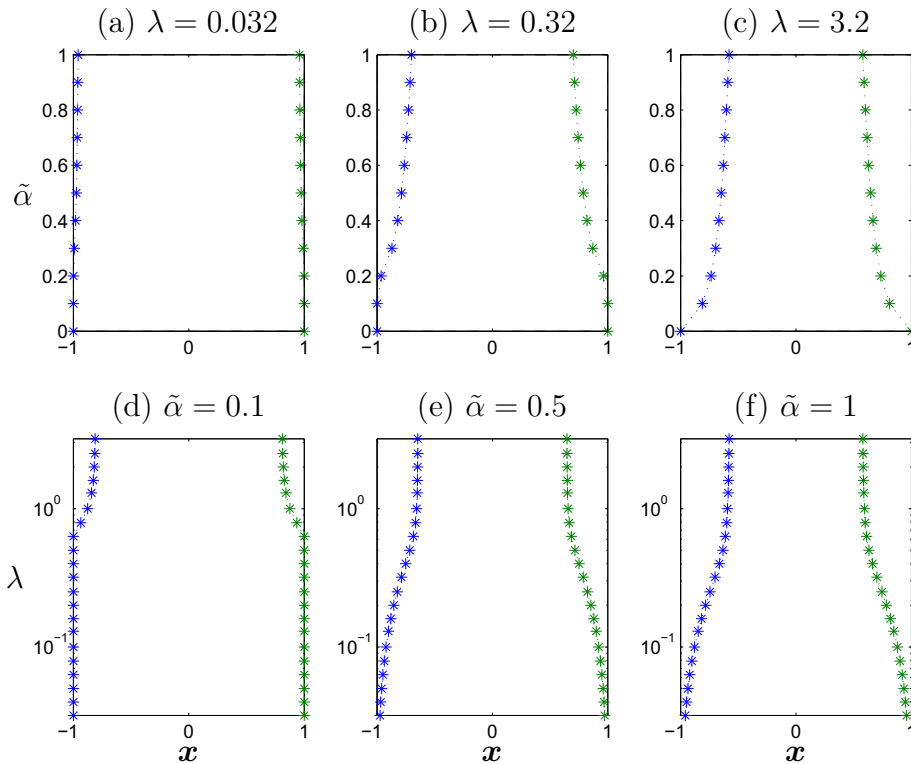


FIG. 3.3 – Protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux pour  $d = 1$ ,  $n = 2$ . (a,b,c) Variation suivant  $\tilde{\alpha}$  à  $\lambda$  fixé. (d,e,f) Variation suivant  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé.

► *Symétrie.* Les protocoles que nous venons de présenter laissent penser que les protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux sont symétriques par rapport au centre de l'intervalle. Bien que cette propriété soit effectivement partagée par la plupart des protocoles que nous avons obtenus, nous avons pu vérifier qu'elle n'était pas vraie en général. Certains protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux sont asymétriques, notamment lorsque la taille  $n$  du protocole est strictement supérieure au nombre  $p$  de paramètres de régression. Pour illustrer ceci, la figure 3.4 montre des protocoles asymétriques obtenus pour  $p = 2$  ( $d = 1$ ),  $n = 3$  et  $\tilde{\alpha} = 0.8$ . En imposant la condition de symétrie, la perte d'efficacité est toutefois relativement faible. Dans le cas présent, pour  $\lambda = 0.1$  par exemple, le protocole optimal est  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}} = \{-0.9067, 0.6363, 0.8760\}$  avec  $\mathcal{T}^* = 1.367$ , tandis que le meilleur protocole symétrique est  $\boldsymbol{\xi}^{\# \mathcal{T}} = \{0, \pm 0.8997\}$  avec  $\mathcal{T}(\boldsymbol{\xi}^{\# \mathcal{T}}) = 1.378$ , soit une efficacité de 0.992.

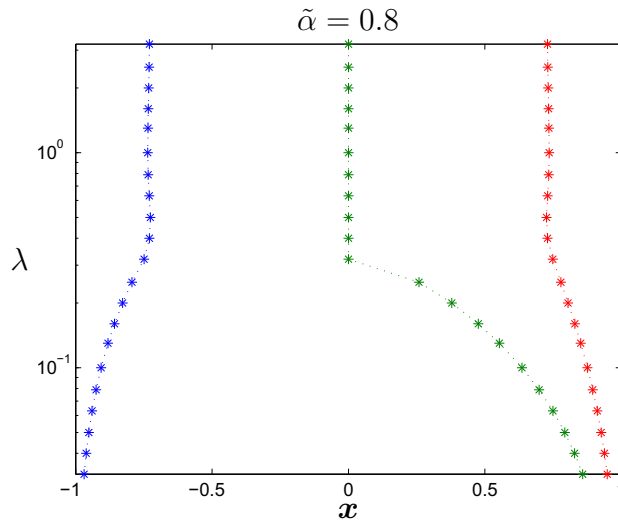


FIG. 3.4 – Mise en évidence de l'asymétrie. Variations suivant  $\lambda$  des protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux pour  $d = 1$ ,  $n = 3$ ,  $\tilde{\alpha} = 0.8$ .

► *Continuité.* Nous avons évoqué plus haut la « pseudo-continuité » des protocoles en  $\alpha$  (ou  $\tilde{\alpha}$ ) et  $\lambda$ . Pour cette propriété aussi, nous pouvons dire qu'elle semble valable pour une large étendue de valeurs des hyperparamètres. Dans quelques cas où cette propriété semblait mise en défaut, une étude approfondie nous porte à croire que la discontinuité apparente est en réalité due à une variation rapide des positions des points des protocoles en fonction des paramètres.

Par exemple, toujours pour  $d = 1$  et  $n = 3$ , à  $\lambda = 0.4$ , la figure 3.5(a) paraît mettre en évidence une discontinuité pour la position du point central. (Notons ici que le protocole tout-variance est en fait  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha} = 0) = \{-1, x_0, 1\}$  avec un point central  $x_0 \in \mathcal{X}$  quelconque.) L'examen rapproché sur la figure 3.5(b) de l'évolution de cette position pour des valeurs de  $\tilde{\alpha}$  proches de 0.2 semble au contraire prouver que la continuité est maintenue.

Rien ne peut cependant être prouvé quant à cette propriété et il paraît sage de ne pas faire de conclusions tranchées sur ce point.

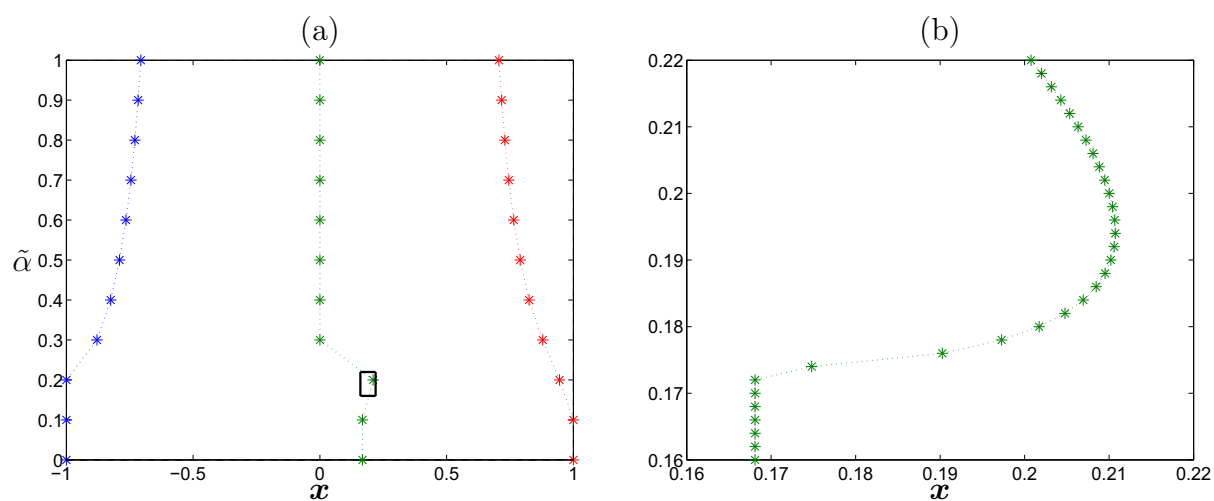


FIG. 3.5 – Observation d’une discontinuité apparente. (a) Variation suivant  $\tilde{\alpha}$  du protocole  $\mathcal{T}$ -optimal pour  $d = 1$ ,  $n = 3$ ,  $\lambda = 0.4$ . (b) Évolution de la position du point central, zoom autour de  $\tilde{\alpha} = 0.2$

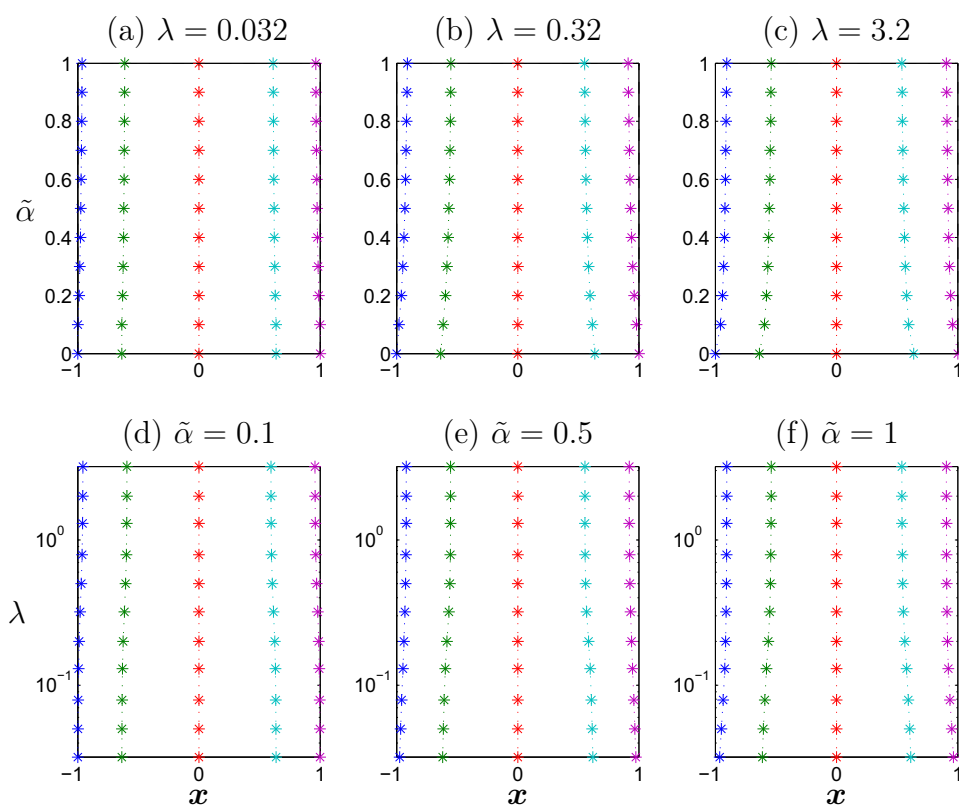


FIG. 3.6 – Protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux pour  $d = 4$ ,  $n = 5$ . (a,b,c) Variation suivant  $\tilde{\alpha}$  à  $\lambda$  fixé. (d,e,f) Variation suivant  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé.

À titre purement illustratif, nous présentons sur la figure 3.6 les variations des protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux pour  $d = 4$  et  $n = 5$ . Les variations en  $\tilde{\alpha}$  et  $\lambda$  sont semblables au cas  $d = 1$   $n = 2$ , mais l'influence de la valeur de ces hyperparamètres sur le protocole optimal est moins grande ici.

La figure 3.7 illustre pour sa part les résultats obtenus pour un domaine expérimental de dimension 2. Par souci de lisibilité, seuls les protocoles tout-biais et tout-variance sont exposés.

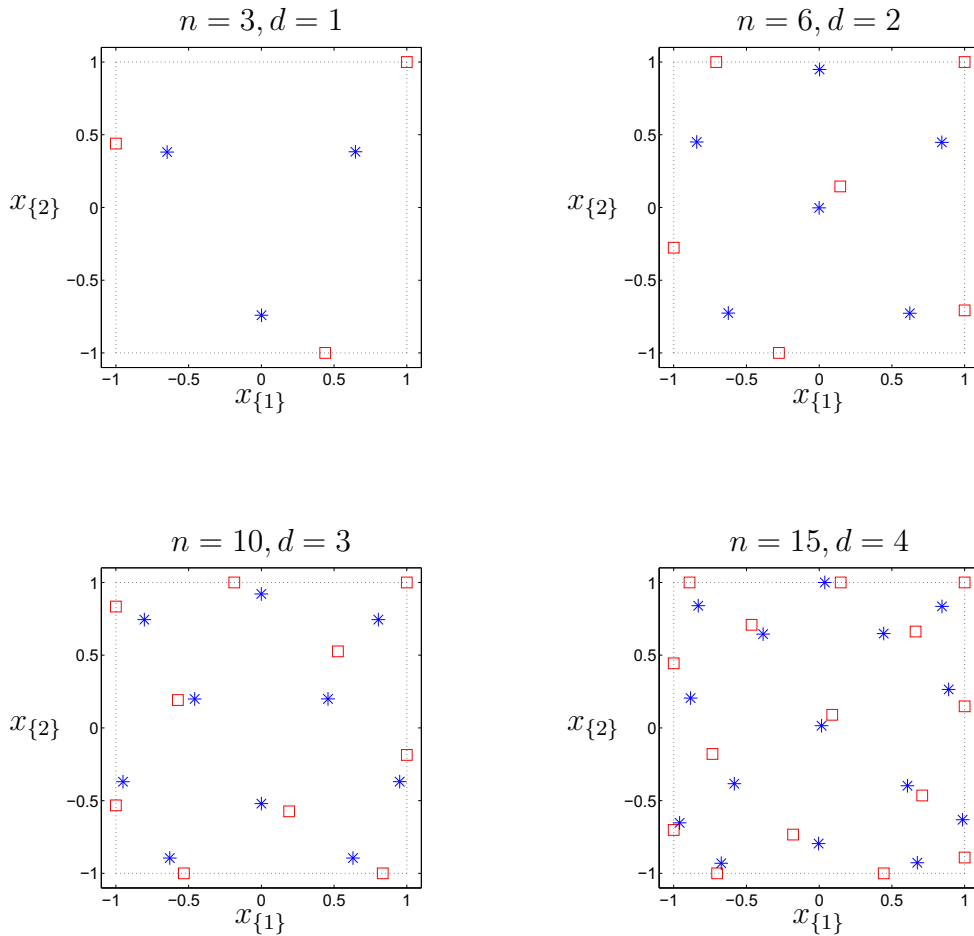


FIG. 3.7 – Protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux sur le domaine expérimental  $[-1; 1]^2$  pour  $\tilde{\alpha} = 0$  ( $\square$ ) et  $\tilde{\alpha} = 1$ ,  $\lambda = 2$  ( $*$ ) pour diverses valeurs de  $d$  et  $n$ .

**Critère  $\mathcal{Q}$ .** Le critère QIEQP n'a pas à notre connaissance d'équivalent dans la littérature. L'idée de prendre comme critère de performance un quantile de l'erreur de prédiction est nouvelle, bien qu'un critère de type quantile ait récemment été utilisé par Pázmán & Pronzato [33] dans le cas de structures non LP. Le quantile considéré est celui d'une fonction d'information, par rapport à une loi a priori sur les paramètres de régression.

À titre comparatif, les protocoles  $\mathcal{Q}$ -optimaux que nous exposons ici correspondent aux mêmes cas que ceux du paragraphe précédent. La figure 3.8 montre les variations en  $\alpha$  et  $\lambda$  des protocoles  $\mathcal{Q}$ -optimaux pour  $n = 2$ ,  $d = 1$  et un domaine expérimental unidimensionnel.

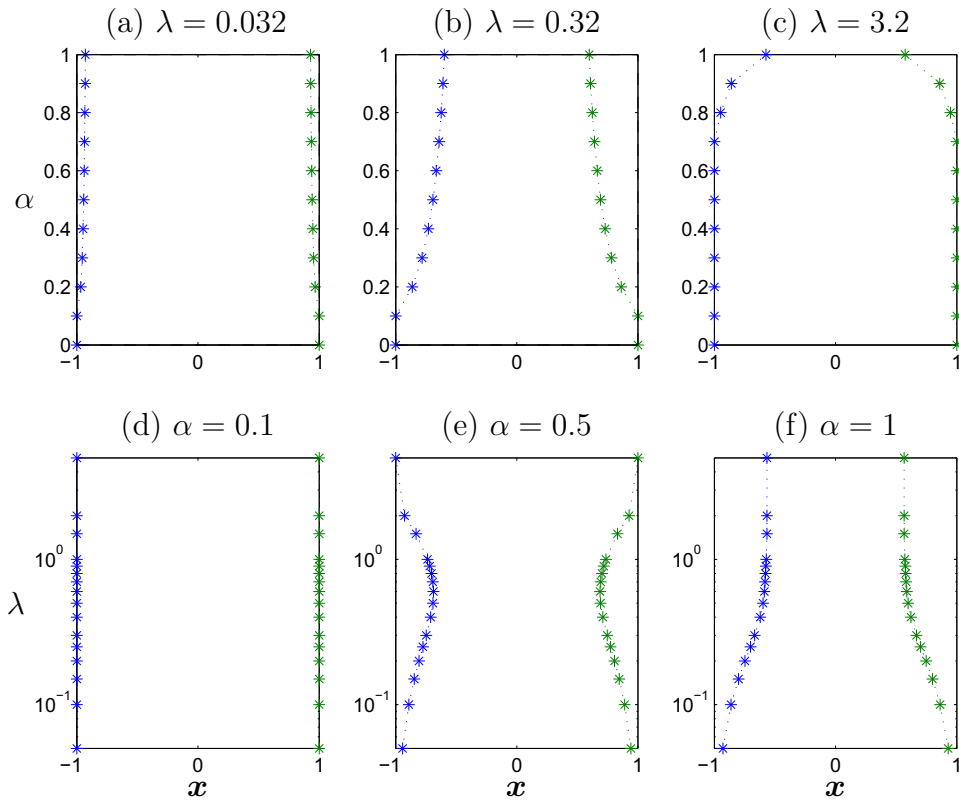


FIG. 3.8 – Protocoles  $\mathcal{Q}$ -optimaux pour  $d = 1$ ,  $n = 2$ . (a,b,c) Variation suivant  $\alpha$  à  $\lambda$  fixé. (d,e,f) Variation suivant  $\lambda$  à  $\alpha$  fixé.

Le comportement est globalement identique à celui des protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux. On peut toutefois noter une tendance accrue des points de support à s'écarter des bornes de l'intervalle. Cette tendance est plus apparente quand la taille du protocole est plus grande, comme le montre la figure 3.9, où l'on peut comparer les protocoles  $\mathcal{T}$ - et  $\mathcal{Q}$ -optimaux pour  $d = 2$ ,  $n = 3$  et  $\lambda = 0.4$ . Notamment, le protocole  $\mathcal{Q}$ -optimal pour  $\alpha = 0$  n'a pas toujours les bornes du domaine comme points de support.

Concernant le comportement asymptotique pour  $\lambda \rightarrow \infty$ , la même remarque que pour les protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux s'applique. L'utilisation du paramètre  $\tilde{\alpha}$  conduit aux mêmes conclusions, comme en atteste la figure 3.10.

La figure 3.11 illustre les résultats obtenus pour un domaine expérimental de dimension 2. Ici aussi, par souci de lisibilité, seuls les protocoles pour  $\tilde{\alpha} = 0$  et  $\tilde{\alpha} = 1$  sont exposés.

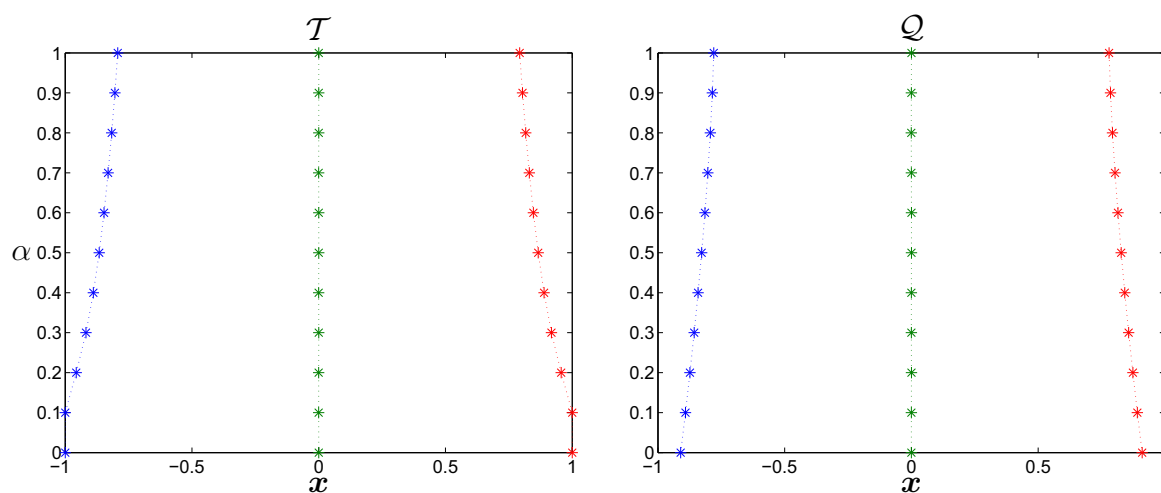


FIG. 3.9 – Comparaison des protocoles  $\mathcal{T}$ - et  $\mathcal{Q}$ -optimaux pour  $d = 2$ ,  $n = 3$ ,  $\lambda = 0.4$ . Variation suivant  $\alpha$ .

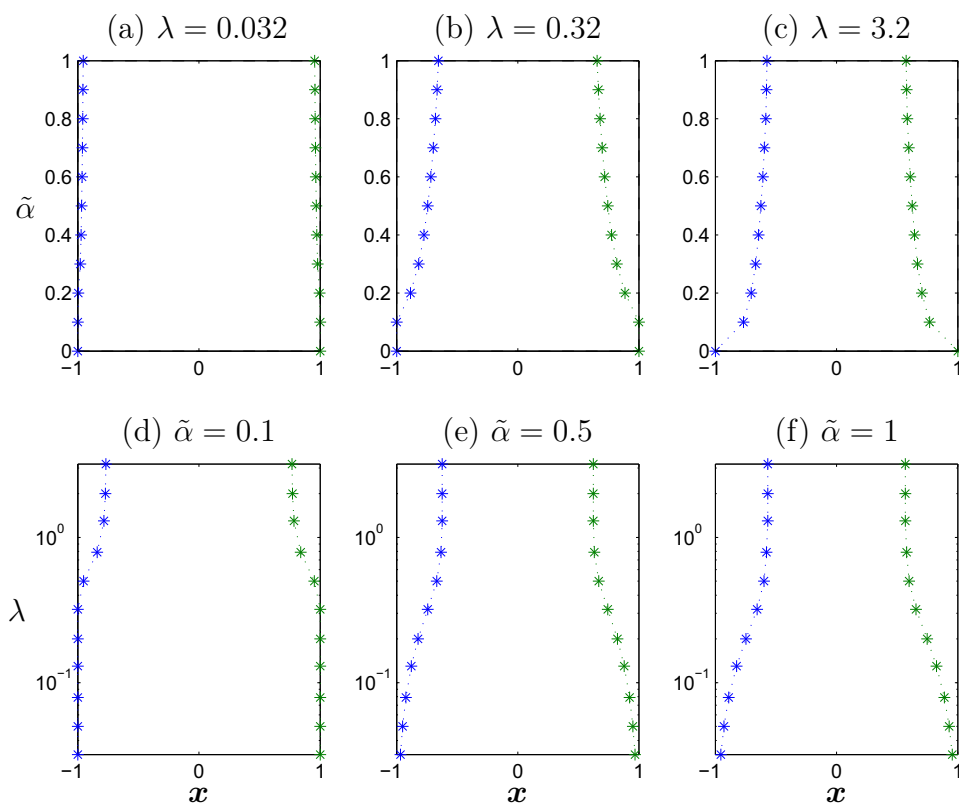


FIG. 3.10 – Protocoles  $\mathcal{Q}$ -optimaux pour  $d = 1$ ,  $n = 2$ . (a,b,c) Variation suivant  $\tilde{\alpha}$  à  $\lambda$  fixé. (d,e,f) Variation suivant  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé.

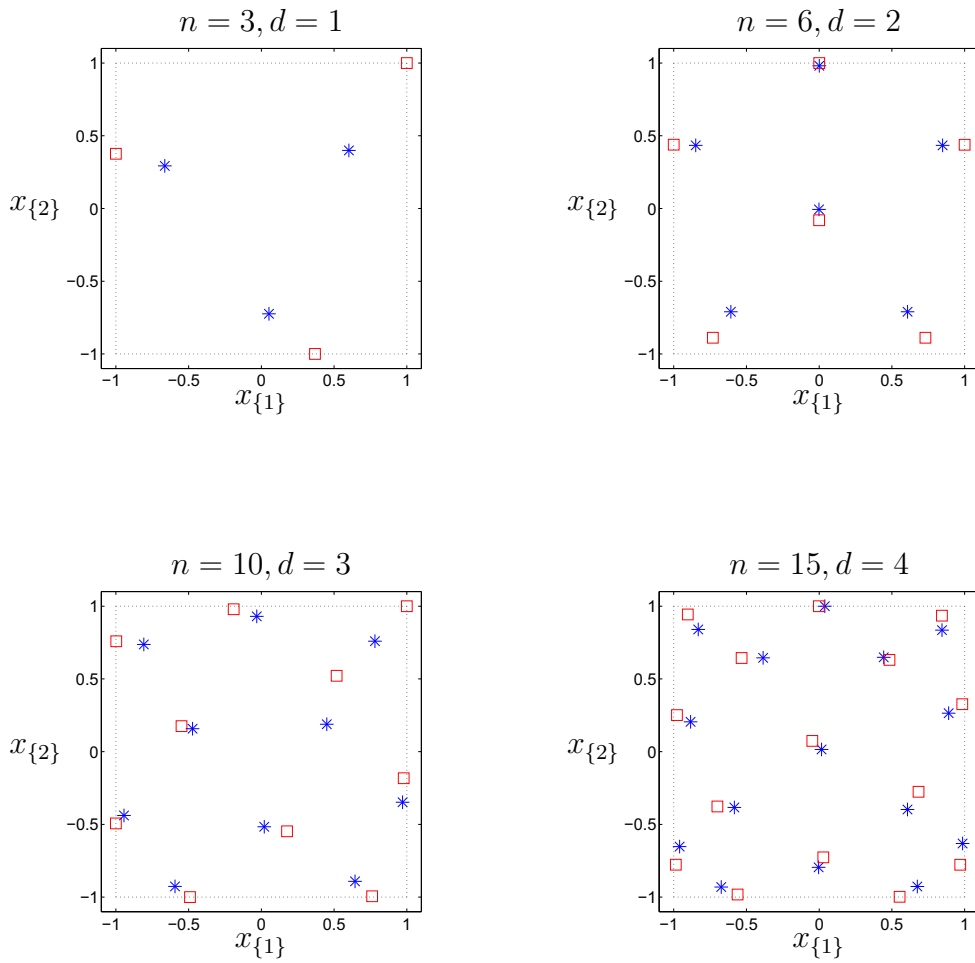


FIG. 3.11 – Protocoles  $\mathcal{Q}$ -optimaux sur le domaine expérimental  $[-1; 1]^2$  pour  $\tilde{\alpha} = 0$  ( $\square$ ) et  $\tilde{\alpha} = 1$ ,  $\lambda = 2$  ( $*$ ) pour diverses valeurs de  $d$  et  $n$ .

## 3.5 S'affranchir des hyperparamètres

### 3.5.1 Un critère maximin sur l'efficacité

La dépendance vis-à-vis d'hyperparamètres ou plus généralement de paramètres inconnus est un problème récurrent dans le domaine du traitement du signal. De l'information a priori peut servir à fixer leurs valeurs. Dans notre cas, il est en effet envisageable d'avoir une idée des distances caractéristiques  $\lambda$  de la fonction de covariance, et de l'importance relative de l'erreur structurelle par rapport au bruit d'observation, qui permet de déterminer  $\alpha$ . Cette information peut toutefois être partielle ou vague, et il est naturel dans ce cas d'envisager une approche bayésienne en introduisant l'information sous forme d'une densité de probabilité a priori.

Nous avons cependant choisi de nous placer dans la situation où l'on ne dispose pas d'information a priori sur la valeur des hyperparamètres. Il n'est en outre pas possible de les estimer à partir des données puisque, par définition, les données ne sont pas disponibles lors de la phase de planification. Il faut donc trouver un autre moyen de s'affranchir de cette dépendance.

Dans la littérature de planification d'expériences, le problème de la dépendance des protocoles vis-à-vis d'hyperparamètres ou de paramètres inconnus est souvent résolu par ce qui est appelé une **analyse de sensibilité** (cf. chapitre 2). L'idée est de « choisir » un jeu de valeurs pour les hyperparamètres tel que le protocole optimal correspondant reste performant pour un modèle dont les hyperparamètres ont des valeurs différentes. La mesure de performance utilisée pour les protocoles est généralement l'efficacité, qui quantifie la qualité d'un protocole, vis-à-vis d'un jeu de paramètres, pour un critère donné (cf. section 1.2.3).

Nous avons pensé qu'il était possible d'aller plus loin qu'une analyse de sensibilité pour obtenir un protocole robuste aux hyperparamètres. Dans un premier temps, comme nous l'avons vu dans l'état de l'art (chapitre 2), on peut être surpris par le fait que les analyses de sensibilité ont un caractère quelque peu empirique en ce sens que le choix des hyperparamètres est plutôt fait de manière qualitative que quantitative, malgré l'utilisation de l'efficacité. Yue & Hickernell [11] (section 2.4) se contentent de montrer que les protocoles tout-biais sont plus efficaces que les protocoles tout-variance dans le cas le plus défavorable. Avec une démarche un peu plus approfondie, Allen, Yu & Schmitz [23] (section 2.3) vérifient simplement que le protocole correspondant au choix qu'ils proposent est effectivement peu sensible aux hyperparamètres, vis-à-vis de plusieurs critères. Il nous a paru intéressant de tenter de rationaliser davantage ce choix en formulant un critère clair de choix des hyperparamètres. Un protocole robuste aux hyperparamètres doit avoir une efficacité maximale sur une large étendue de valeurs pour ceux-ci. Un critère de type maximin apparaît alors adapté à la situation. Pour un critère d'optimalité  $\mathcal{J}$  dépendant d'un vecteur d'hyperparamètres  $\mathbf{h}$ , on peut définir, dans l'esprit d'une analyse

de sensibilité, une valeur optimale des hyperparamètres :

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^* &= \arg \max_{\mathbf{h}} \min_{\mathbf{h}_0} \mathcal{E}_{\mathcal{J}(\mathbf{h}_0)}(\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}}(\mathbf{h})) \\ &= \arg \max_{\mathbf{h}} \mathcal{M}_1^{\mathcal{J}}(\mathbf{h}), \end{aligned} \quad (3.22)$$

$\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}}(\mathbf{h})$  étant le protocole optimal correspondant au jeu de valeurs  $\mathbf{h}$  pour le critère  $\mathcal{J}$ , et  $\mathcal{E}_{\mathcal{J}(\mathbf{h}_0)}(\boldsymbol{\xi})$  l'efficacité (définie par (1.2)) du protocole  $\boldsymbol{\xi}$  vis-à-vis du jeu de valeurs  $\mathbf{h}_0$ .

Le protocole  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}}(\mathbf{h}^*)$  retenu par ce critère est systématiquement pris parmi les protocoles optimaux au sens du critère initial  $\mathcal{J}$ . Cela apparaît à première vue comme une limitation. Par ailleurs, un critère tel que (3.22) pose problème dans notre cas. En effet, au vu des résultats de la section précédente (3.4) (voir par exemple les figures 3.1 et 3.8), il est naturel de penser que les valeurs optimales au sens de ce critère ne sont pas définies de manière unique, puisqu'un même protocole peut vraisemblablement être optimal pour plusieurs jeux de valeurs des hyperparamètres.

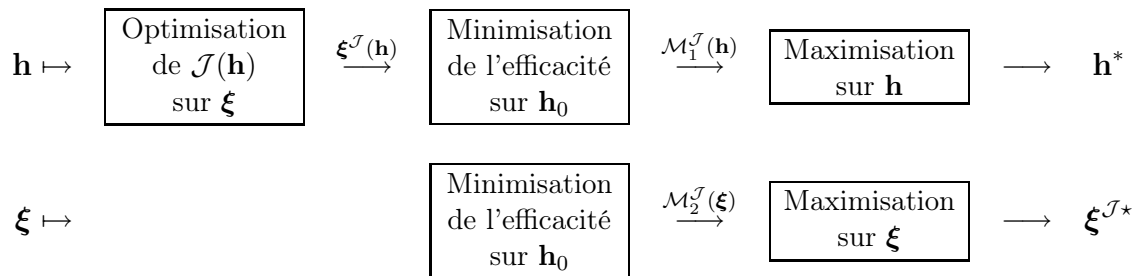
En fin de compte, c'est un protocole que nous recherchons, les valeurs des hyperparamètres ne nous intéressent pas en elles-mêmes. Définir un critère d'optimalité directement sur le protocole semble donc plus approprié. En gardant la même idée directrice, nous définissons alors un protocole robuste aux hyperparamètres de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}^*} &= \arg \max_{\boldsymbol{\xi}} \min_{\mathbf{h}_0} \mathcal{E}_{\mathcal{J}(\mathbf{h}_0)}(\boldsymbol{\xi}) \\ &= \arg \max_{\boldsymbol{\xi}} \mathcal{M}_2^{\mathcal{J}}(\boldsymbol{\xi}). \end{aligned} \quad (3.23)$$

**REMARQUE.** Des critères maximin tels que (3.23) ont déjà été proposés dans la littérature de planification d'expériences, essentiellement pour l'estimation de paramètres dans le cas des modèles non LP, pour lesquels les protocoles optimaux dépendent typiquement de la valeur des paramètres de régression (voir par exemple Pronzato & Walter [34], Müller [35], Schwabe [36], Biedermann & al. [37], Dette & al. [38]). En revanche, en planification robuste à une erreur structurelle, il n'y a pas à notre connaissance d'équivalent. Les travaux de Dette & Franke [20] peuvent être considérés comme intermédiaires. Dans le cas des modèles polynomiaux, et afin d'assurer une bonne estimation pour le degré choisi tout en garantissant une bonne efficacité pour les tests de validation du modèle, ils cherchent à maximiser le minimum de la D-efficacité pour le degré choisi et des  $D_1$ -efficacités pour les degrés proches. Il ne s'agit donc pas à proprement parler d'approche robuste à une erreur structurelle, même si l'incertitude sur le modèle est envisagée. Par ailleurs, le minimum de l'efficacité est pris sur un unique paramètre discret, contrairement à notre approche.

Le critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{J}}$  a l'avantage supplémentaire d'alléger la charge calculatoire. L'optimisation du critère (3.22) nécessite en effet une sous-optimisation supplémentaire puisqu'il est nécessaire de calculer  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{J}}(\mathbf{h})$ , ce qu'on peut représenter par le schéma ci-dessous. On pourrait penser a priori que le calcul de l'efficacité requiert par ailleurs une optimisation, puisqu'il nécessite l'évaluation de la valeur optimale du critère en  $\mathbf{h}_0$ . Nous avons toutefois trouvé un moyen de contourner ce problème : à partir du moment où le critère  $\mathcal{J}$  est

continu par rapport aux hyperparamètres, la valeur optimale  $\mathcal{J}^*$  du critère est continue en  $\mathbf{h}$ . Une simple estimation de celle-ci est donc envisageable à partir d'une interpolation par exemple. Il suffit par conséquent de réaliser au préalable l'optimisation pour un nombre limité de valeurs des hyperparamètres. Nous verrons les détails de cette méthode d'optimisation au chapitre 4.



### 3.5.2 Spécificités des critères $\mathcal{T}$ et $\mathcal{Q}$

Les critères  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$  sont bien continus en  $(\alpha, \lambda)$  et la méthode proposée pour le calcul du critère  $\mathcal{M}_2$  peut être appliquée. Dans le cas du critère du quantile, la charge calculatoire reste tout de même trop importante et les temps de calcul sont prohibitifs : le temps d'évaluation du quantile étant de l'ordre de la seconde (voir section 4.1), celui de l'évaluation du critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{Q}}$  est de l'ordre de la dizaine de minutes, ce qui ne permet pas d'envisager son optimisation en un temps raisonnable. Le caractère approché du calcul du quantile rend par ailleurs l'optimisation assez hasardeuse (problème de dérivabilité du critère). C'est pourquoi nous n'avons pas de résultats probants pour le critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{Q}}$ . Comme nous allons le voir dans la suite de cette section, certains résultats obtenus sur le critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$  nous permettent toutefois d'envisager un palliatif, qui, à défaut de garantir l'optimalité, rend l'optimisation moins coûteuse.

**Hyperparamètre  $\lambda$ .** Avec la paramétrisation choisie, le paramètre  $\lambda$  peut varier entre 0 et  $+\infty$ . Nous avons évoqué à la section précédente pourquoi ces valeurs extrêmes sont d'un intérêt pratique limité. Elles sont par ailleurs problématiques du point de vue numérique, car elles entraînent souvent des erreurs importantes dans le calcul du critère ou aboutissent à un critère très « plat » autour de l'optimum. Dans ces conditions, nous nous sommes vus contraints de restreindre la valeur possible de  $\lambda$  à un intervalle moindre  $[\lambda^-; \lambda^+]$ . Comme on peut s'y attendre, le protocole  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}^*}$  obtenu dépend de l'intervalle choisi. Nous allons cependant voir que sous certaines conditions la variabilité en  $\lambda^-$  et  $\lambda^+$  est suffisamment faible pour qu'on puisse considérer le protocole « limite » correspondant à l'intervalle  $[0; +\infty[$  quasiment atteint.

Reprenons le cas simple  $n = 2, d = 1$ . Les protocoles  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}^*}$  obtenus sont symétriques :  $\boldsymbol{\xi}^{\mathcal{T}^*} = \{\pm x^*\}$ . Le tableau 3.1 présente les valeurs de  $x^*$  pour différents intervalles  $[\lambda^-; \lambda^+]$ . On remarque d'une part que la valeur de  $x^*$  ne dépend pas de  $\lambda^-$ . D'autre part, il semble

ici encore qu'on ait un comportement asymptotique, puisque  $x^*$  varie de moins en moins avec  $\lambda^+$  quand celui-ci augmente.

$x^*$	$\lambda^- = 0.1$	$\lambda^- = 0.2$	$\lambda^- = 0.5$	$\lambda^- = 1$
$\lambda^+ = 1$	0.7180	0.7180	0.7180	0.7180
$\lambda^+ = 1.5$	0.7064	0.7064	0.7064	0.7064
$\lambda^+ = 2$	0.7025	0.7025	0.7025	0.7025
$\lambda^+ = 2.5$	0.7006	0.7006	0.7006	0.7006
$\lambda^+ = 3$	0.6997	0.6997	0.6997	0.6997

TAB. 3.1 – Protocoles robustes aux hyperparamètres pour  $n = 2$ ,  $d = 1$  :  $\xi^{\mathcal{T}^*} = \{\pm x^*\}$ .

On peut avoir une intuition de la raison pour laquelle  $x^*$  ne dépend pas de  $\lambda^-$ .

- 1- D'une part, nous savons que quand  $\lambda \rightarrow 0$ , l'ETIEQP tend vers le critère de  $I$ -optimalité, c'est-à-dire qu'on retrouve le cas  $\tilde{\alpha} = 0$ .
- 2- D'autre part, l'analyse des résultats de la section précédente nous a portés à croire que, à  $n$  et  $d$  fixés, et pour un domaine expérimental unidimensionnel, les protocoles  $\mathcal{T}$ -optimaux  $\xi^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha} = 0)$  et  $\xi^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha} = 1, \lambda = \lambda^+)$  étaient en quelque sorte des protocoles « extrêmes », en ce sens que leurs points de support encadrent ceux des protocoles optimaux pour les autres valeurs des hyperparamètres :

$$\left| x_{[i]}^{\mathcal{T}}(1, \lambda^+) \right| \leq \left| x_{[i]}^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha}, \lambda) \right| \leq \left| x_{[i]}^{\mathcal{T}}(0) \right|, \quad 1 \leq i \leq n, \quad 0 < \tilde{\alpha} \leq 1, \quad \lambda < \lambda^+,$$

$x_{[i]}^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha}, \lambda)$  étant la statistique d'ordre  $i$  du protocole  $\mathcal{T}$ -optimal  $\xi^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha}, \lambda)$ . On peut concevoir intuitivement que l'efficacité d'un protocole est fortement liée à la distance entre ses points de support et ceux du protocole optimal pour le jeu de paramètres correspondant. L'efficacité d'un protocole sera donc vraisemblablement la plus faible pour ces valeurs extrêmes des hyperparamètres. C'est vrai pour  $n = 2$ ,  $d = 1$ ; dans ce cas, les protocoles atteignent effectivement le minimum de leur efficacité pour  $\tilde{\alpha} = 0$  ou  $(\tilde{\alpha} = 1, \lambda = \lambda^+)$ .

Ces deux remarques nous mènent à penser que minimiser l'efficacité sur un ensemble qui inclut le cas  $\tilde{\alpha} = 0$  équivaudrait à considérer  $\lambda^- = 0$ , rendant  $x^*$  indépendant du  $\lambda^-$  effectivement choisi.

Si la propriété évoquée au point -2- ci-dessus était vérifiée pour tout  $n$  et tout  $d$ , on pourrait par ailleurs faciliter grandement l'optimisation en minimisant l'efficacité, non plus sur l'ensemble indénombrable  $\{(\tilde{\alpha}, \lambda) : 0 \leq \tilde{\alpha} \leq 1, \lambda^- \leq \lambda \leq \lambda^+\}$ , mais plus simplement sur l'ensemble à deux éléments  $\{(\tilde{\alpha} = 0), (\tilde{\alpha} = 1, \lambda = \lambda^+)\}$ . Malheureusement, dans le cas général, et plus particulièrement quand  $s$  et  $n$  augmentent, la notion de distance entre protocoles paraît plus floue, et nous avons pu vérifier qu'un protocole quelconque, et même proche de l'optimum, peut atteindre le minimum de son efficacité pour d'autres valeurs de  $\tilde{\alpha}$  et  $\lambda$ . L'idée de simplification du critère paraît donc hasardeuse. Nous discuterons plus en détails de ces points à la section 4.2.

### 3.5.3 Protocoles $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux

Nous présentons maintenant les protocoles  $\xi^{T^*}$  obtenus par optimisation numérique pour des domaines de dimension  $s = 1$  et  $2$ , et diverses valeurs de  $n$  et  $d$ , pour  $\tilde{\alpha}$  compris entre  $0$  et  $1$  et en ayant une étendue assez large de valeurs en  $\lambda$  :  $\lambda^- = 0.013$  et  $\lambda^+ = 3.2$ . Ces valeurs proviennent de la discrétisation exponentielle en  $\lambda$  utilisée pour l'interpolation de la  $\mathcal{T}$ -efficacité (voir chapitre 4.2.4). Notons que la valeur de  $\lambda^+$  est supérieure à la plus grande distance entre deux points sur les domaines considérés, de dimension  $s < 3$ .

Pour  $s = 1$ , les protocoles  $\xi^{T^*}$  semblent être tous symétriques. Cette idée est appuyée par le fait que, si l'on symétrise un protocole obtenu par optimisation numérique, c'est-à-dire qu'on considère le protocole

$$\xi^{T\dagger} = \left\{ \pm \frac{\mathbf{x}_{[1]} - \mathbf{x}_{[n]}}{2}, \dots, \pm \frac{\mathbf{x}_{[E(\frac{n+1}{2})]} - \mathbf{x}_{[E(\frac{n}{2})]}}{2} \right\},$$

celui-ci est à chaque fois plus performant que celui de départ. On pourrait donc raisonnablement envisager d'imposer la condition de symétrie, afin d'alléger l'optimisation en réduisant la dimension de l'espace de recherche de  $n$  à  $E(\frac{n}{2})$ .

Voici quelques exemples de protocoles optimaux symétrisés  $\xi^{T^*}$ , et la valeur optimale correspondante  $\mathcal{M}^* = \mathcal{M}_2^T(\xi^{T^*})$  du critère :

- $n = 2, d = 1, \xi^{T^*} = \{\pm 0.6994\}, \mathcal{M}^* = 0.7930$  ;
- $n = 3, d = 1, \xi^{T^*} = \{0, \pm 0.8251\}, \mathcal{M}^* = 0.8649$  ;
- $n = 3, d = 2, \xi^{T^*} = \{0, \pm 0.8338\}, \mathcal{M}^* = 0.8874$  ;
- $n = 4, d = 2, \xi^{T^*} = \{\pm 0.2515, \pm 0.8784\}, \mathcal{M}^* = 0.8321$  ;
- $n = 4, d = 3, \xi^{T^*} = \{\pm 0.3636, \pm 0.8945\}, \mathcal{M}^* = 0.9198$  ;
- $n = 5, d = 3, \xi^{T^*} = \{0, \pm 0.4907, \pm 0.9130\}, \mathcal{M}^* = 0.9119$ .

Pour  $s = 2$ , les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux ne sont généralement pas symétriques au sens strict. La symétrie par rapport à un axe principal ou à une diagonale est cependant rarement loin, et on obtient généralement des protocoles très efficaces en symétrisant les protocoles optimaux. La figure 3.12 montre quelques exemples de protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux. Dans les cas où ils ne présentent pas de symétrie, nous proposons des protocoles  $\xi^{T\dagger}$  quasi-optimaux, symétrisés selon l'axe qui paraît le plus adapté.

Pour  $n = 3, d = 1$  par exemple, le protocole  $\mathcal{M}_2^T$ -optimal n'est symétrique par rapport à aucun axe. Il ressemble par contre très fortement à un triangle équilatéral centré sur le point  $O$  centre du domaine :

$$\xi_3^{T^*} = \begin{Bmatrix} 0.0882 & -0.8699 & 0.7844 \\ 0.9512 & -0.4046 & -0.5564 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.8158.$$

Le triangle équilatéral centré symétrique (par rapport à l'axe vertical) le plus performant

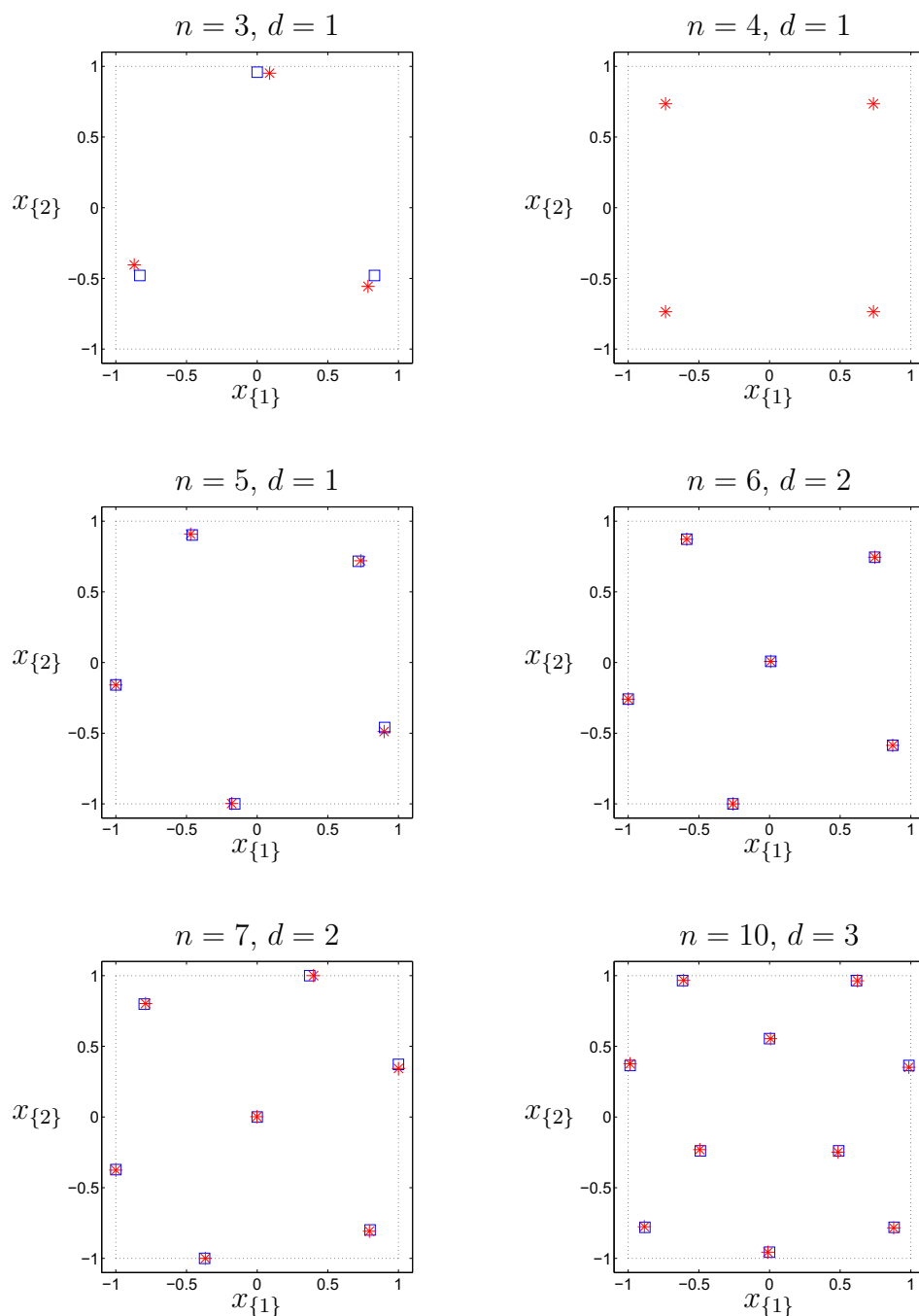


FIG. 3.12 – (\*) Protocoles  $\xi^{\mathcal{T}^*}$  sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$  et (□) protocoles symétriques quasi-optimaux proposés  $\xi^{\mathcal{T}^\dagger}$ , pour diverses valeurs de  $d$  et  $n$ .

$\xi_3^{T\dagger}$  a une efficacité supérieure à  $1 - 10^{-4}$  :

$$\xi_3^{T\dagger} = \begin{Bmatrix} 0 & \pm 0.8303 \\ 0.9588 & -0.4794 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi_3^{T\dagger}) = 0.99998.$$

Pour  $n = 4$ ,  $d = 1$ , le protocole  $\mathcal{M}_2^T$ -optimal est bien symétrique par rapport aux deux axes et aux deux diagonales : il s'agit d'un carré centré sur O et de côté égal à 1.4713 :

$$\xi_4^{T*} = \begin{Bmatrix} \pm 0.7357 \\ \pm 0.7357 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.7468.$$

Pour  $n = 5$ ,  $d = 1$ , le protocole  $\mathcal{M}_2^T$ -optimal est un pentagone quasiment symétrique par rapport à la première diagonale du domaine :

$$\xi_5^{T*} = \begin{Bmatrix} -0.4708 & 0.7330 & -1 & 0.8988 & -0.1802 \\ 0.9074 & 0.7196 & -0.1589 & -0.4884 & -0.9974 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.7824.$$

En symétrisant par rapport à cette diagonale, on obtient encore une fois un protocole d'efficacité supérieure à  $1 - 10^{-4}$  :

$$\xi_5^{T\dagger} = \begin{Bmatrix} -0.4796 & 0.7263 & -0.9987 & 0.9031 & -0.1695 \\ 0.9031 & 0.7263 & -0.1695 & -0.4796 & -0.9987 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi_5^{T\dagger}) = 0.99995.$$

Pour  $n = 6$ ,  $d = 2$ , on retrouve un pentagone, auquel vient s'ajouter un point central proche de O :

$$\xi_6^{T*} = \begin{Bmatrix} -0.5864 & 0.7443 & 0.0083 & -1 & 0.8726 & -0.2574 \\ 0.8718 & 0.7452 & 0.0085 & -0.2599 & -0.5851 & -1 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.8978.$$

Le protocole symétrisé par rapport à la première diagonale  $\xi_6^{T\dagger}$  obtient ici une efficacité supérieure à  $1 - 10^{-6}$  :

$$\xi_6^{T\dagger} = \begin{Bmatrix} -0.5857 & 0.7447 & 0.0084 & -1 & 0.8722 & -0.2587 \\ 0.8722 & 0.7447 & 0.0084 & -0.2587 & -0.5857 & -1 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi_6^{T\dagger}) = 0.9999995.$$

Pour  $n = 7$ ,  $d = 2$ , il s'agit d'un hexagone à nouveau complété par un point central.

$$\xi_7^{T*} = \begin{Bmatrix} 0.4310 & -0.7625 & 1 & -0.0005 & -1 & 0.7637 & -0.4279 \\ 1 & 0.8320 & 0.3038 & 0.0004 & -0.3084 & -0.8312 & -1 \end{Bmatrix},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.7928.$$

La symétrisation par rapport à la deuxième diagonale donne le protocole  $\xi_7^{T\dagger}$  d'efficacité supérieure à  $1 - 10^{-5}$  :

$$\xi_7^{T\dagger} = \left\{ \begin{array}{ccccccc} 0.4294 & -0.7631 & 1 & -0.0005 & -1 & 0.7631 & -0.4294 \\ 1 & 0.8316 & 0.3061 & 0.0005 & -0.3061 & -0.8316 & -1 \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi_7^{T\dagger}) = 0.999998.$$

Pour  $n = 10$ ,  $d = 3$ , on retrouve une quasi-symétrie par rapport à l'axe vertical :

$$\xi_{10}^{T*} = \left\{ \begin{array}{ccccc} -0.6081 & 0.6223 & 0.0071 & -0.9870 & 0.9859 \\ 0.9666 & 0.9632 & 0.5546 & 0.3770 & 0.3520 \\ -0.4939 & 0.4846 & -0.8853 & 0.8788 & -0.0119 \\ -0.2305 & -0.2486 & -0.7761 & -0.7845 & -0.9563, \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{M}^* = 0.9124.$$

Le protocole symétrisé a une nouvelle fois une excellente efficacité :

$$\xi_{10}^{T\dagger} = \left\{ \begin{array}{cccccc} \pm 0.6152 & 0 & \pm 0.9865 & \pm 0.4893 & \pm 0.8821 & 0 \\ 0.9649 & 0.5546 & 0.3645 & -0.2396 & -0.7803 & -0.9563 \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi_{10}^{T\dagger}) = 0.99994.$$

Ces quelques exemples de protocoles optimaux vont nous permettre à la section suivante de comparer notre approche dans sa globalité vis-à-vis d'autres approches issues de la littérature.

Bien qu'il soit difficile de dégager une règle quelconque sur l'évolution de la valeur de  $\mathcal{M}^*$  par rapport à  $s$ ,  $n$  et  $d$ , on peut tout de même noter qu'elle reste élevée sur ces exemples, la valeur la plus faible étant 0.75 obtenue dans le cas  $s = 2$ ,  $n = 4$ ,  $d = 1$ . C'est un premier indicateur de la validité de notre approche puisque des valeurs trop faibles de  $\mathcal{M}^*$  signifieraient qu'il est utopique de vouloir conserver une bonne  $\mathcal{T}$ -efficacité sur une large étendue de valeurs pour  $\tilde{\alpha}$  et  $\lambda$ .

### 3.6 Comparaisons

Afin de vérifier la validité de notre approche, nous comparons maintenant les protocoles obtenus par notre méthode à quelques autres issus de la littérature. La sélection des méthodes avec lesquelles nous effectuons une comparaison a été guidée par leur pertinence vis-à-vis de la problématique posée. Nous n'avons notamment retenu que des travaux concernant la recherche de protocoles exacts.

L'étude porte sur les domaines expérimentaux  $[-1; 1]$  et  $[-1; 1]^2$ , en accord avec la section 3.4.1, avec différentes valeurs de  $d$  et  $n$  selon les cas. Pour garantir la généralité des résultats et conformément à la littérature, les critères de comparaison utilisés sont des efficacités.

### 3.6.1 Protocoles $\mathcal{T}$ - et $\mathcal{Q}$ -optimaux

Avant de les confronter à la littérature, comparons dans un premier temps entre eux les protocoles optimaux au sens du critère  $\mathcal{Q}$  et ceux issus de l'optimisation du critère  $\mathcal{T}$ . Pour juger du bénéfice relatif d'un critère par rapport à l'autre, on compare les efficacités croisées, à valeurs identiques des hyperparamètres, c'est-à-dire

$$\mathcal{E}_{\mathcal{Q}(n,d,\tilde{\alpha},\lambda)}(\xi^{\mathcal{T}}(n,d,\tilde{\alpha},\lambda)) \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_{\mathcal{T}(n,d,\tilde{\alpha},\lambda)}(\xi^{\mathcal{Q}}(n,d,\tilde{\alpha},\lambda)),$$

qui reflètent la qualité du protocole optimal au sens d'un des critères, vis-à-vis de l'autre critère.

La figure 3.13 présente ces efficacités croisées, pour diverses valeurs des hyperparamètres, rassemblées sous forme d'histogrammes afin d'avoir un point de vue global du comportement des protocoles optimaux au sens d'un critère, vis-à-vis de l'autre critère. Nous avons distingué les cas des deux domaines expérimentaux. Les histogrammes sont établis à partir de plus d'un millier de combinaisons d'hyperparamètres pour  $s = 1$  (avec en particulier  $2 \leq n \leq 5$ ), de même pour  $s = 2$  ( $3 \leq n \leq 10$ ).

Dans les mêmes conditions d'hyperparamètres, les protocoles optimaux au sens d'un des deux critères restent très efficaces pour l'autre, avec une efficacité supérieure à 95% pour la totalité des combinaisons testées. Cette propriété ne semble pas dépendre de la dimension du domaine. Il n'y a par ailleurs pas de prédominance visible d'un type de protocole par rapport à l'autre, les histogrammes des efficacités étant sensiblement identiques, et cela aussi bien sur  $[-1; 1]$  que sur  $[-1; 1]^2$ .

Par conséquent, il n'y a aucune raison particulière de préférer le critère  $\mathcal{Q}$  au critère  $\mathcal{T}$  ou inversement, excepté la volonté a priori d'avoir une approche de type quantile plutôt qu'en moyenne, et réciproquement.

Par ailleurs, on peut être convaincu que les protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux robustes aux hyperparamètres pour le critère  $\mathcal{T}$  sont très efficaces relativement au critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{Q}}$ . À défaut de pouvoir calculer les protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{Q}}$ -optimaux, on pourra alors se contenter des protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux.

Afin d'illustrer ces résultats, comparons sur un exemple les performances de divers protocoles.

On prend comme exemple le cas  $s = 1$ ,  $n = 4$ ,  $d = 3$ , avec  $\lambda = 1.3$ ,  $\tilde{\alpha} = 0.3$  et  $\sigma_e^2 = 0.7$ . Les protocoles choisis sont les suivants :

- $\mathcal{T}$ -optimal :  $\xi^{\mathcal{T}}(\tilde{\alpha}, \lambda) = \{\pm 0.3683, \pm 0.9037\}$  ;
- $\mathcal{Q}$ -optimal :  $\xi^{\mathcal{Q}}(\tilde{\alpha}, \lambda) = \{\pm 0.3588, \pm 0.8864\}$  ;
- $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimal :  $\xi^{\mathcal{T}^*} = \{\pm 0.3636, \pm 0.8945\}$  ;
- $I$ -optimal :  $\xi^I = \{\pm 0.4307, \pm 1\}$  ;
- $D$ -optimal :  $\xi^D = \{\pm 0.4640, \pm 1\}$ .

Le tableau 3.2 présente les résultats obtenus en termes de valeurs des critères et d'efficacités, et classe les protocoles selon ces performances.

On vérifie que les protocoles  $\mathcal{T}$ - et  $\mathcal{Q}$ -optimaux sont très proches, avec des efficacités croisées supérieures à 99%. Le protocole  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimal est également très proche de ces

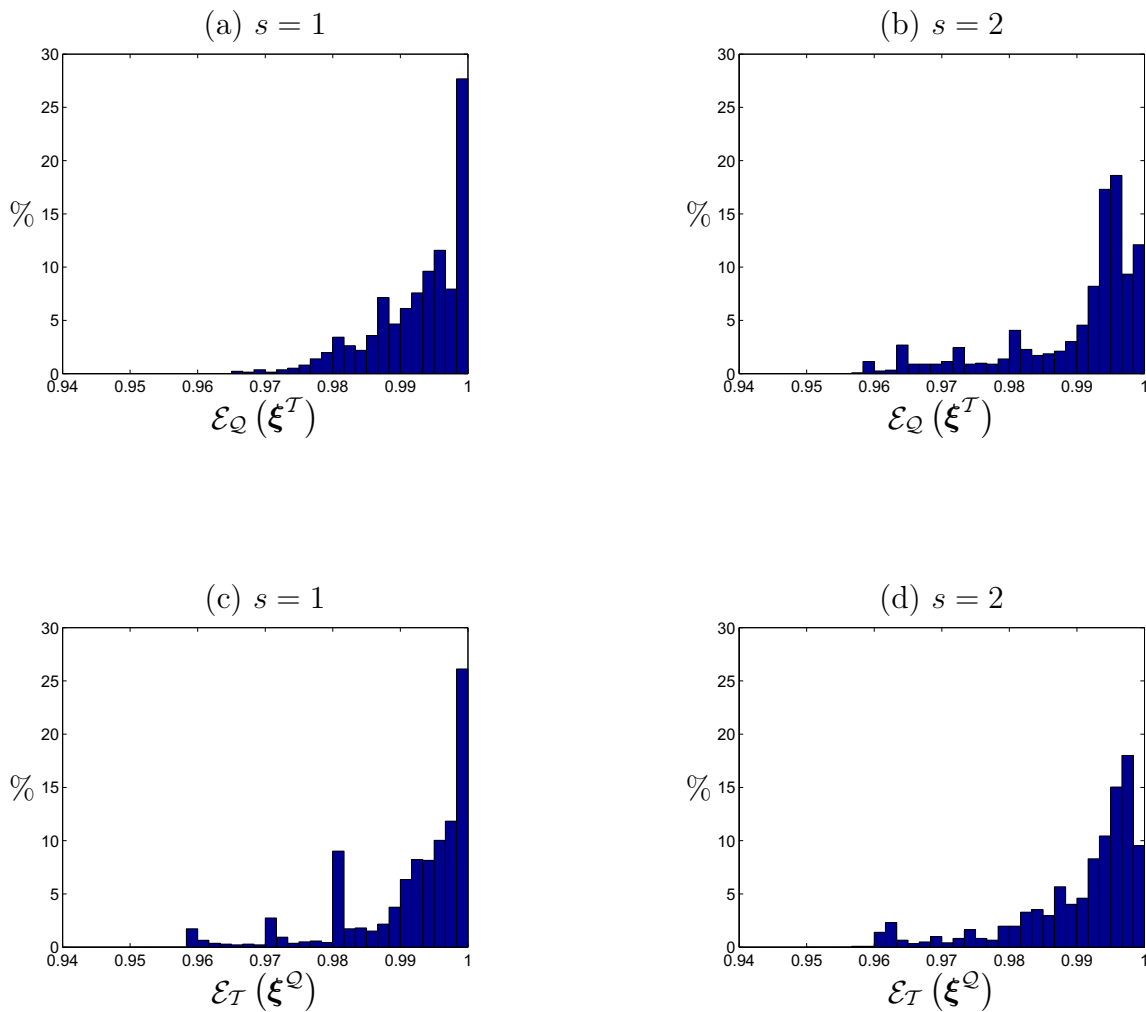


FIG. 3.13 – Comparaison par histogrammes des efficacités croisées des protocoles  $T$ - et  $Q$ -optimaux : (a,c) pour un domaine de dimension  $s = 1$ , (b,d) pour un domaine de dimension  $s = 2$ .

deux protocoles, avec une efficacité supérieure à 99.8% pour les deux critères  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$ . Les classements des divers protocoles vis-à-vis des deux critères montrent une hiérarchie bien définie. Les protocoles  $\mathcal{T}$ - et  $\mathcal{Q}$ -optimaux arrivent bien évidemment en première position pour leur critère respectif, et en troisième position pour l'autre critère, juste derrière le protocole  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimal, deuxième pour les deux critères. Celui-ci semble donc réaliser une sorte de compromis entre la  $\mathcal{T}$ - et la  $\mathcal{Q}$ -optimalité. Le protocole  $I$ -optimal prend la quatrième place dans les deux cas, tandis que le protocole  $D$ -optimal est en dernière position.

$\xi$	$\xi^{\mathcal{T}}$	$\xi^{\mathcal{T}^*}$	$\xi^{\mathcal{Q}}$	$\xi^I$	$\xi^D$
$\mathcal{T}$ : efficacité	1	0.9981	0.9931	0.8468	0.8070
$\mathcal{T}$ : classement	1	2	3	4	5
$\mathcal{Q}$ : efficacité	0.9918	0.9981	1	0.7711	0.7098
$\mathcal{Q}$ : classement	3	2	1	4	5

TAB. 3.2 – Classement des protocoles en fonction de leur efficacité vis-à-vis des critères  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$ .

À titre illustratif, la figure 3.14 présente la densité de probabilité de l'IEQP obtenue pour les protocoles  $\mathcal{Q}$ -,  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -,  $I$ -, et  $D$ -optimaux.

### 3.6.2 Protocoles à distance minimax et à distance maximin

Johnson, Moore et Ylvisaker [10] proposent des protocoles dits à distance maximin et à distance minimax pour des expériences sans bruit d'observation (typiquement des codes de calcul). L'indépendance de ces protocoles vis-à-vis du modèle de régression, associée au fait qu'on en retrouve certains dans des contextes robustes (chez Yue & Hickernell [11], section 2.4, et chez Hickernell & Liu [9] par exemple), fait de ces protocoles un choix possible et raisonnable dans le cas où le modèle est incertain. Ils ont par ailleurs des propriétés d'optimalité asymptotique (au sens de critères non définis ici par souci de concision) si la fonction-cible est modélisée par un processus gaussien dont la fonction de covariance  $c_t$  est une fonction décroissante d'une certaine distance  $\mathcal{D}$  définie sur  $\mathfrak{X}^2$  :

$$c_t(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = c_t(\mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')).$$

Nous avons donc pensé qu'ils constituaient un bon premier test pour la vérification de la validité de notre approche.

Ces deux types de protocole sont définis comme suit :

- les protocoles mM (miniMax) minimisent la distance maximale  $\mathcal{D}_M$  entre un point quelconque du domaine et le plus proche point de support du protocole :  $\mathcal{D}_M(\xi) = \max_{\mathbf{x} \in \mathfrak{X}} \min_i \mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$  ;
- les protocoles Mm (Maximin) maximisent la distance minimale  $\mathcal{D}_m$  entre deux points de support distincts du protocole :  $\mathcal{D}_m(\xi) = \min_{i \neq j} \mathcal{D}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ .

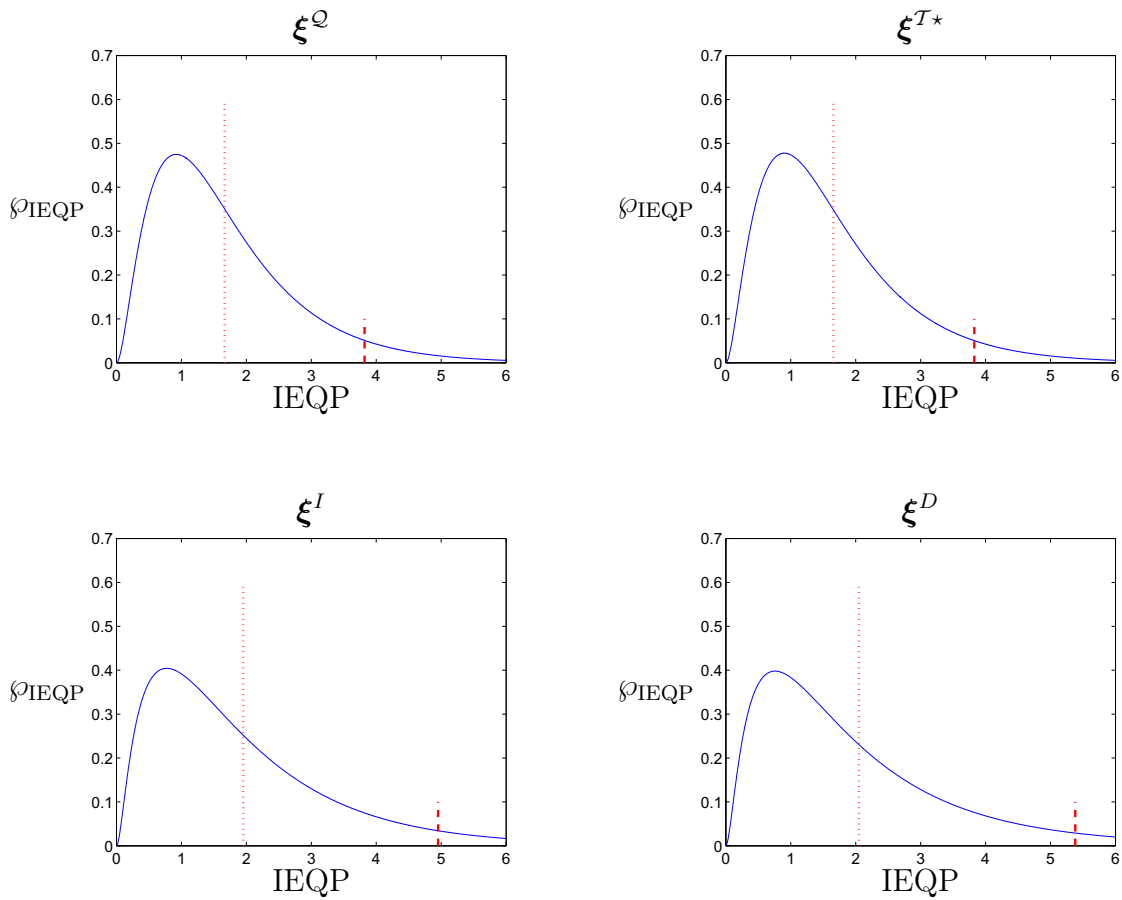


FIG. 3.14 – Densité de probabilité de l'IEQP pour divers protocoles dans le cas  $s = 1$ ,  $n = 4$ ,  $d = 3$ , avec  $\lambda = 1.3$ ,  $\tilde{\alpha} = 0.3$  et  $\sigma_e^2 = 0.7$ . Les pointillés marquent l'ETIEQP, les tirets le QIEQP.

Les protocoles obtenus dépendent donc uniquement du domaine expérimental  $\mathfrak{X}$ , du nombre  $n$  de points de support, et de la distance  $\mathcal{D}$  utilisée. La distance maximale entre un protocole mM et un point quelconque de  $\mathfrak{X}$  est appelée **distance minimax** et notée  $\mathcal{D}_M^*$ . Similairement pour les protocoles Mm, la distance minimale entre deux points de support d'un tel protocole est appelée **distance maximin** et notée  $\mathcal{D}_m^*$ .

Sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ , la distance utilisée est la distance euclidienne. Les protocoles mM et Mm ont leurs points de support équirépartis sur l'intervalle et sont donnés par :

$$\begin{aligned} \xi_n^{\text{mM}} &= \left\{ \frac{-(n - (2i - 1))}{n}, 1 \leq i \leq n \right\} && \text{avec } \mathcal{D}_M^* = \frac{1}{n}, \\ \xi_n^{\text{Mm}} &= \left\{ \frac{-(n - (2i - 1))}{n - 1}, 1 \leq i \leq n \right\} && \text{avec } \mathcal{D}_m^* = \frac{2}{n - 1}. \end{aligned}$$

Le tableau 3.3 compare les efficacités croisées,  $\mathcal{E}_{\mathcal{D}_M}(\xi_n^{\mathcal{T}^*})$  et  $\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}}(\xi_n^{\text{mM}})$  d'une part, et  $\mathcal{E}_{\mathcal{D}_m}(\xi_n^{\mathcal{T}^*})$  et  $\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}}(\xi_n^{\text{Mm}})$  d'autre part, pour différentes valeurs de  $n$  et  $d$ .

	$\mathcal{E}_{\mathcal{D}_M}(\xi^{\mathcal{T}^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}}(\xi^{\text{mM}})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{D}_m}(\xi^{\mathcal{T}^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}}(\xi^{\text{Mm}})$
$n = 2, d = 1$	0.715	0.721	0.699	0.229
$n = 3, d = 1$	0.808	0.816	0.825	0.534
$n = 3, d = 2$	0.800	0.647	0.834	0.353
$n = 4, d = 2$	0.798	0.733	0.755	0.514
$n = 4, d = 3$	0.688	0.481	0.796	0.432
$n = 5, d = 3$	0.815	0.681	0.845	0.502

TAB. 3.3 – Comparaison des efficacités croisées des protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux avec les protocoles à distance minimax et à distance maximin sur le domaine  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ .

On voit que, d'une manière générale, les protocoles  $\xi^{\mathcal{T}^*}$  se comportent bien vis-à-vis des critères  $\mathcal{D}_M$  et  $\mathcal{D}_m$ , avec une efficacité toujours supérieure à 65% et rarement inférieure à 70%. Pour un protocole  $\xi^{\mathcal{T}^*}$  donné, les efficacités relativement à ces deux critères sont peu différentes, ce qui mène à penser qu'il réalise un bon compromis entre la mM- et la Mm-optimalité.

Les protocoles mM ont également une bonne efficacité envers notre critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$  tant que  $d \leq 1$ , mais leur efficacité baisse rapidement avec  $d$ . Au contraire, les protocoles Mm sont plutôt peu efficaces mais leur efficacité semble augmenter légèrement avec  $d$ , sans toutefois atteindre les 60% sur les exemples considérés. Il semble toutefois difficile de dégager un comportement général.

La figure 3.15 présente les efficacités comparées sous forme d'histogrammes, permettant la comparaison d'un point de vue global. Elle met en valeur la similarité de la tenue des protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux vis-à-vis des critères  $\mathcal{D}_M$  et  $\mathcal{D}_m$  et leur constance en terme de qualité, ainsi que la supériorité des protocoles mM par rapport aux Mm.

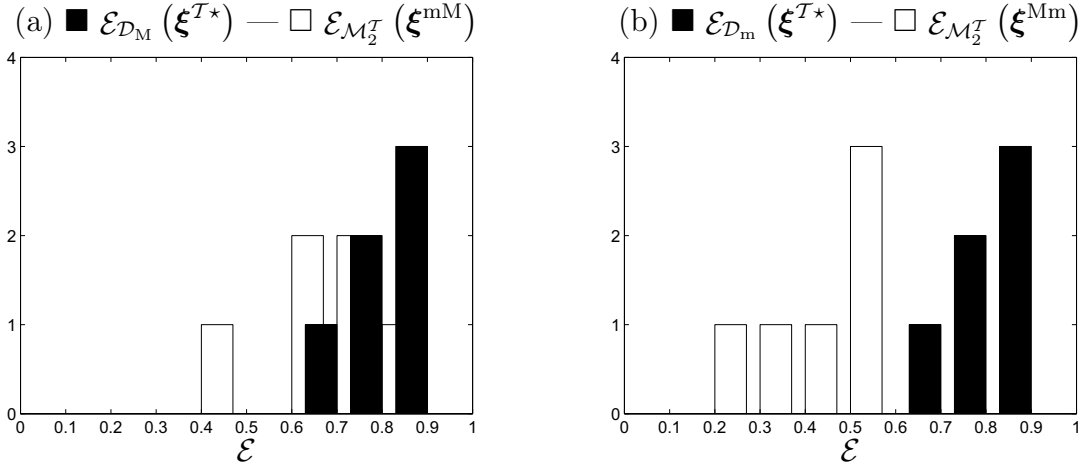


FIG. 3.15 – Comparaison de nos protocoles avec ceux de Johnson & al. : histogrammes des efficacités croisées pour les six cas étudiés sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ .

Les piètres résultats obtenus par les protocoles Mm en dimension un nous incite à les ignorer pour le domaine de dimension deux. Nous choisissons par contre de tester les protocoles mM pour deux types de distance : la classique distance euclidienne, et la distance dite **rectangulaire** définie comme la somme des distances projetées sur les axes principaux. Ces protocoles, notés  $\xi^{\text{mM}(e)}$  (respectivement  $\xi^{\text{mM}(r)}$ ) pour la distance euclidienne (respectivement rectangulaire) sont décrits dans [10] pour  $\mathfrak{X} = [0; 1]^2$  et  $n = 3, 5$  et  $7$ . On obtient les protocoles sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$  par homothétie-translation (cf. section 3.4.1), et les distances optimales sont multipliées par le rapport d'homothétie, soit 2. Le cas  $n = 4$  est trivial de par les symétries du problème, et le protocole optimal est le même pour les deux distances :

$$\xi^{\text{mM}(e)} = \xi^{\text{mM}(r)} = \left\{ \begin{array}{c} \pm \frac{1}{2} \\ \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{D}_{\text{M}(e)}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \mathcal{D}_{\text{M}(r)}^* = 1.$$

Le tableau 3.4 compare les efficacités croisées.

	$\mathcal{E}_{\mathcal{D}_{\text{M}(e)}}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{\text{mM}(e)})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{D}_{\text{M}(r)}}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{\text{mM}(r)})$
$n = 3, d = 1$	0.942	0.522	0.925	0.541
$n = 4, d = 1$	0.680	0.609	0.680	0.609
$n = 5, d = 1$	0.640	0.475	0.667	0.718
$n = 7, d = 2$	0.808	0.773	0.834	0.878

TAB. 3.4 – Comparaison des efficacités croisées des protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux avec les protocoles à distance minimax et à distance maximin sur le domaine  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$ .

Dans l'ensemble, les résultats pour un même type de protocole sont plus disparates qu'en dimension un, avec une plus grande amplitude de variation des efficacités sur les exemples, pourtant moins nombreux. Les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux restent tout de même les plus constants dans la qualité, le pire résultat pour eux étant une efficacité à 64%, tandis que les protocoles mM pour les deux distances descendent sous les 55%. Les protocoles  $\xi^{\text{mM}(r)}$  affichent un bilan plus satisfaisant que les protocoles  $\xi^{\text{mM}(e)}$ , surclassant ces derniers dans les quatre cas étudiés.

La comparaison des histogrammes sur la figure 3.16 confirme ces impressions.

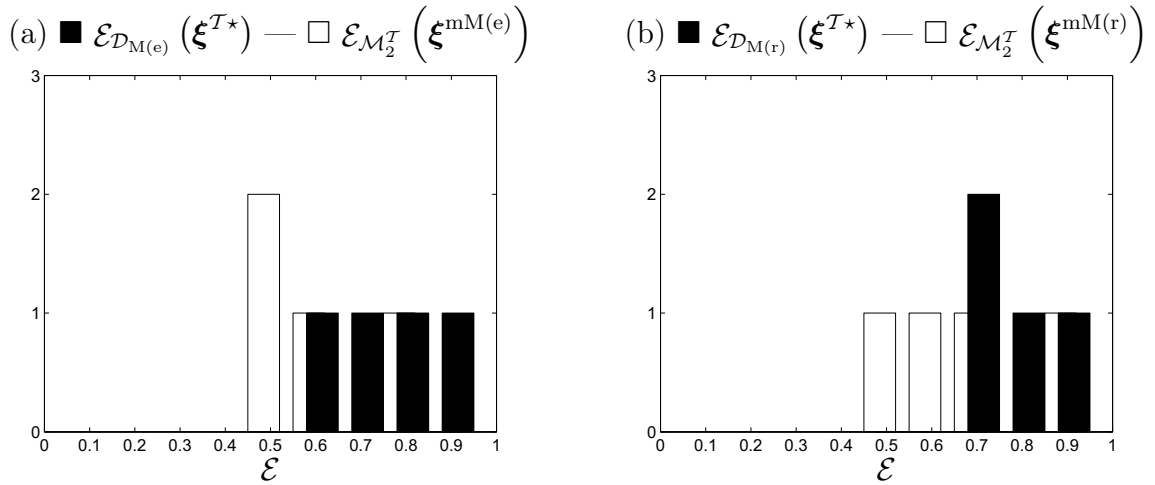


FIG. 3.16 – Comparaison de nos protocoles avec ceux de Johnson & al. : histogrammes des efficacités croisées pour les quatre cas étudiés sur  $\mathcal{X} = [-1; 1]^2$ .

Ce qu'on peut retenir de cette étude est que les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux sont efficaces envers les critères  $\mathcal{D}_m$  et  $\mathcal{D}_M$  de type purement géométriques. Les protocoles mM affichent dans l'ensemble d'assez bonnes efficacités vis-à-vis du critère  $\mathcal{M}_2^T$ , avec de très bons résultats dans certaines situations, mais de faibles résultats ailleurs. La comparaison des efficacités croisées, qui a mis en évidence cette moins bonne régularité, est donc favorable aux protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux.

### 3.6.3 Protocoles EIMSE-optimaux (Allen, Yu & Schmitz)

Il semble naturel de comparer notre approche avec la plus proche de la littérature, à savoir celle d'Allen, Yu & Schmitz [23] (section 2.3). Le critère ETIEQP étant une généralisation du critère EIMSE, il nous est facile de calculer les protocoles EIMSE-optimaux, une fois les hyperparamètres fixés. Le choix des hyperparamètres est celui proposé par les auteurs : l'erreur de modélisation est telle que le modèle de la cible est polynomial complet de degré  $d+1$ , la matrice de covariance a priori des paramètres  $\bar{\theta}$  étant égale à  $\Sigma = \gamma^2 \sigma_e^2 \mathbf{1}_q$  avec  $\gamma = 0.4$  ou  $\gamma = 2$ . On choisit le degré  $d$  du polynôme de régression inférieur d'une unité à celui supposé représenter la cible. Les protocoles EIMSE-optimaux

(cf. section 2.3) — notés ici  $\mathcal{A}$ -optimaux par souci de concision — correspondants sont notés respectivement  $\xi^{\mathcal{A}(0.4)}$  et  $\xi^{\mathcal{A}(2)}$

Le tableau 3.5 et la figure 3.17 montrent la comparaison des efficacités croisées pour le domaine unidimensionnel  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ .

	$\mathcal{E}_{\mathcal{A}(0.4)}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{\mathcal{A}(0.4)})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{A}(2)}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{\mathcal{A}(2)})$
$n = 2, d = 1$	0.933	0.479	0.999	0.971
$n = 3, d = 1$	0.936	0.552	0.999	0.979
$n = 3, d = 2$	0.911	0.361	0.959	0.637
$n = 4, d = 2$	0.865	0.370	0.955	0.603
$n = 4, d = 3$	0.924	0.422	0.939	0.485
$n = 5, d = 3$	0.916	0.513	0.931	0.515

TAB. 3.5 – Comparaison des efficacités croisées des protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux avec les protocoles EIMSE-optimaux sur le domaine  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ .

Les résultats sont nets : les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux ont une très bonne efficacité relativement au critère  $\mathcal{A}$ , ne passant qu'une seule fois sous la barre des 90%. Ils surpassent systématiquement, et largement pour la plupart des exemples, les protocoles  $\mathcal{A}$ -optimaux. À propos de ces derniers, ceux pour  $\gamma = 2$  ont une meilleure tenue que ceux pour  $\gamma = 0.4$ , ce qui confirme les résultats d'Allen, Yu & Schmitz.

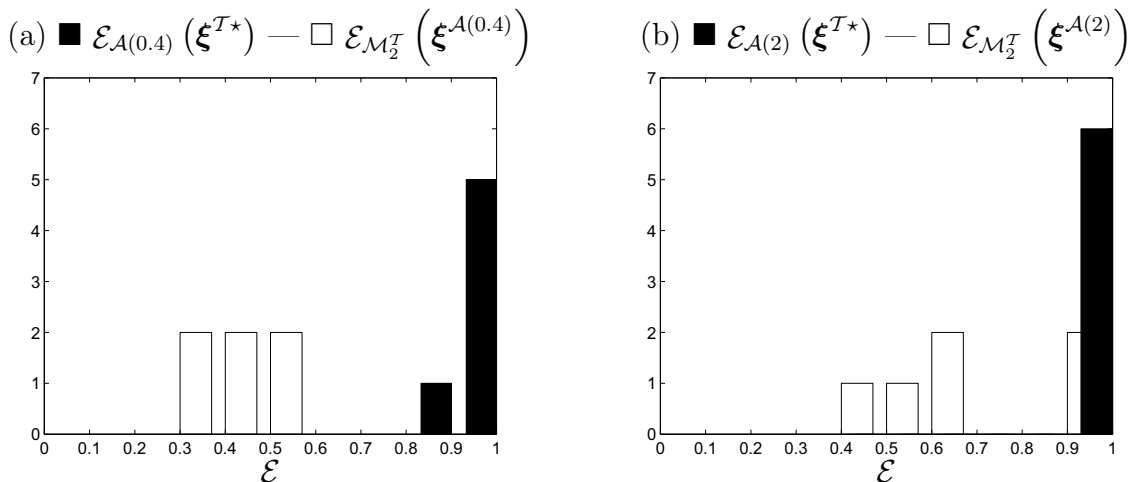


FIG. 3.17 – Comparaison de nos protocoles avec ceux de Allen, Yu & Schmitz : histogrammes des efficacités croisées pour les six cas étudiés sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]$ .

Le tableau 3.6 et la figure 3.18 montrent la comparaison des efficacités croisées pour le domaine  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$ .

	$\mathcal{E}_{\mathcal{A}(0.4)}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{A(0.4)})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{A}(2)}(\xi^{T^*})$	$\mathcal{E}_{\mathcal{M}_2^T}(\xi^{A(2)})$
$n = 3, d = 1$	0.956	0.752	0.971	0.907
$n = 4, d = 1$	0.988	0.827	0.957	0.888
$n = 5, d = 1$	0.990	0.851	0.959	0.889
$n = 6, d = 2$	0.936	0.679	0.987	0.898
$n = 7, d = 2$	0.881	0.519	0.996	0.983
$n = 10, d = 3$	0.924	0.635	0.958	0.737

TAB. 3.6 – Comparaison des efficacités croisées des protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux avec les protocoles EIMSE-optimaux sur le domaine  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$ .

On peut faire les mêmes remarques en dimension deux qu'en dimension un. La domination des protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux, bien que parfaitement nette, n'est pas aussi marquée, les valeurs des efficacités étant plus élevées pour l'ensemble des exemples et des protocoles. Les protocoles  $\mathcal{A}(2)$ -optimaux ont notamment une bonne efficacité envers le critère  $\mathcal{M}_2^T$ .

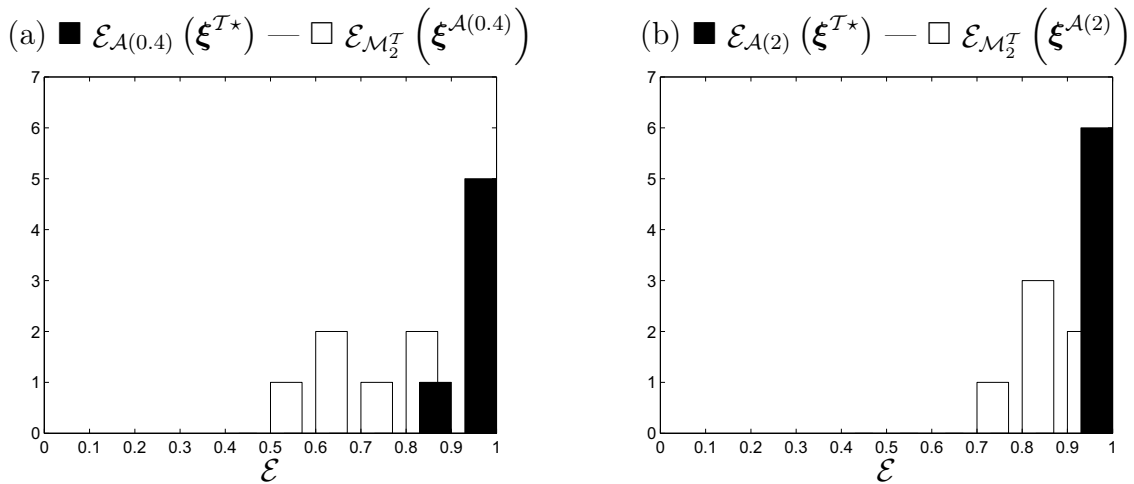


FIG. 3.18 – Comparaison de nos protocoles avec ceux de Allen, Yu & Schmitz : histogrammes des efficacités croisées pour les six cas étudiés sur  $\mathfrak{X} = [-1; 1]^2$ .

La comparaison des protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux aux  $\mathcal{A}$ -optimaux proposés par Allen, Yu & Schmitz est donc largement favorable aux premiers. Avec de meilleurs résultats qu'à la section précédente, les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux prouvent une nouvelle fois leur très bon comportement vis-à-vis d'autres critères.

## 3.7 Conclusion

L'approche que nous venons de présenter pour la planification d'expériences robuste à l'erreur structurelle se caractérise à deux niveaux.

En premier lieu, la modélisation proposée de l'erreur structurelle par un processus gaussien permet une caractérisation probabiliste globale de la performance du prédicteur vis-à-vis des incertitudes sur le modèle de la cible et sur les observations, ce qui offre la possibilité d'en prendre l'espérance ou le quantile pour obtenir deux nouveaux critères d'optimalité.

En second lieu, les protocoles optimaux correspondants dépendent généralement de la valeur d'un ou plusieurs hyperparamètres. Bien qu'il soit raisonnable de penser que certains de ces paramètres peuvent être fixés a priori par l'expérimentateur, d'autres peuvent rester délicats à spécifier, parmi lesquels les paramètres de la covariance du processus. Pour résoudre le problème de cette dépendance par rapport aux hyperparamètres, nous avons mis en œuvre un critère de type maximin de l'efficacité. Les protocoles optimaux au sens de ce critère, robustes à la fois envers l'erreur structurelle et les hyperparamètres, se sont révélés extrêmement polyvalents au sens qu'ils restent particulièrement efficaces pour diverses situations et critères d'optimalité.

Le chapitre suivant présente les méthodes numériques qui nous ont permis de calculer tous les protocoles présentés jusqu'ici.

## Chapitre 4

# Considérations numériques

Dans ce chapitre sont examinés les problèmes numériques rencontrés et les méthodes mises en œuvre pour les résoudre.

Le calcul du quantile de l'IEQP par une procédure satisfaisant aux contraintes de temps de calcul et de précision imposées est développé dans la première section du chapitre. La deuxième section aborde les diverses questions liées à l'optimisation des critères  $\mathcal{T}$ ,  $\mathcal{Q}$  et  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ .

## 4.1 Calcul du quantile

Nous allons détailler ici la méthode de calcul du quantile de l'IEQP. Dans les grandes lignes, la méthode repose sur le schéma suivant. En discrétisant l'intégrale  $\int r^2$  sur  $N_d$  points, l'IEQP peut s'écrire sous la forme d'une somme de  $N_d + p$  carrés de variables aléatoires  $\mathbf{g}$  conjointement gaussiennes (cf. section 3.3.2). La fonction caractéristique de l'IEQP ainsi discrétisée s'exprime facilement à partir des valeurs propres de la matrice de covariance  $\Sigma_{\mathbf{g}}$ . Par transformée de Fourier couplée à une intégration, on obtient ensuite la fonction de répartition de l'IEQP qui donne la fonction quantile par inversion fonctionnelle.

Outre la discrétisation initiale de l'intégrale, trois sources d'approximation numérique apparaissent :

- le calcul des valeurs propres de la matrice de covariance  $\Sigma_{\mathbf{g}}$ ,
- la transformation de Fourier réalisée par TFD,
- l'interpolation de la fonction de répartition pour l'évaluation du quantile.

Ces approximations numériques feront l'objet d'un nécessaire compromis précision/temps de calcul.

### 4.1.1 Description de la méthode

Voyons maintenant les détails des étapes du calcul du quantile. Nous avons vu à la section 3.3.2 que l'IEQP discrétisée pouvait s'écrire

$$\text{IEQP} = \sum_{k=1}^{N_d+p} g_k^2 = \mathbf{g}^\top \mathbf{g}, \quad \text{avec } \mathbf{g} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_{(N_d+p) \times 1}, \Sigma_{\mathbf{g}}). \quad (4.1)$$

La fonction caractéristique de cette variable aléatoire est donnée par

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{IEQP}}(u) &= \mathbb{E}_{\mathbf{g}} \left\{ e^{iu\mathbf{g}^\top \mathbf{g}} \right\} \\ &= \int_{\mathbb{R}^{N_d+p}} e^{iu\mathbf{g}^\top \mathbf{g}} \varphi(\mathbf{g}) \, d\mathbf{g} \\ &= (2\pi)^{-(N_d+p)/2} (\det \Sigma_{\mathbf{g}})^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^{N_d+p}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{g}^\top (\Sigma_{\mathbf{g}}^{-1} - 2iu\mathbf{I}_{N_d+p}) \mathbf{g} \right\} \, d\mathbf{g} \\ &= (\det \Sigma_{\mathbf{g}})^{-1/2} (\det (\Sigma_{\mathbf{g}}^{-1} - 2iu\mathbf{I}_{N_d+p}))^{-1/2} \\ &= (\det (\mathbf{I}_{N_d+p} - 2iu\Sigma_{\mathbf{g}}))^{-1/2}. \end{aligned}$$

En notant  $(\Lambda_k)_{1 \leq k \leq N_d+p}$  les valeurs propres de  $\Sigma_{\mathbf{g}}$ , on obtient alors

$$\Phi_{\text{IEQP}}(u) = \prod_{k=1}^{N_d+p} (1 - 2iu\Lambda_k)^{-1/2}. \quad (4.2)$$

La fonction caractéristique de l'IEQP discrétisée ne dépend donc finalement que des valeurs propres de la matrice de covariance  $\Sigma_{\mathbf{g}}$ . On remarque qu'on retrouve l'expression de

la fonction caractéristique d'un  $\chi^2$  à  $N_d + p$  degrés de liberté si toutes les valeurs propres sont égales à 1.

L'expression ci-dessus (4.2) de la fonction caractéristique nous permet de calculer la fonction de répartition. On sait par définition que la fonction caractéristique est la transformée de Fourier inverse de la densité de probabilité (au facteur  $2\pi$  près) :

$$\Phi_{\text{IEQP}}(u) = \int_{\mathbb{R}} e^{iuw} \wp_{\text{IEQP}}(w) dw = 2\pi \mathcal{F}^{-1} \{ \wp_{\text{IEQP}}(w) \} (u).$$

La DDP n'est par conséquent rien d'autre que la transformée de Fourier de la fonction caractéristique :

$$\begin{aligned} \wp_{\text{IEQP}}(w) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-iuw} \Phi_{\text{IEQP}}(u) du \\ &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F} \{ \Phi_{\text{IEQP}}(u) \} (w). \end{aligned}$$

Pour obtenir la fonction de répartition, dont la dérivée est la DDP, on a recours à la transformée de Fourier sur les distributions tempérées. La solution est donnée par :

$$\mathbb{F}_{\text{IEQP}}(w) = \frac{i}{2\pi} \mathcal{F} \left\{ \text{vp} \frac{\Phi_{\text{IEQP}}(u)}{u} \right\} (w) + \frac{1}{2},$$

où vp désigne la valeur principale de Cauchy.

La figure 4.1 résume le principe du calcul de la fonction de répartition à partir de la fonction caractéristique.

### 4.1.2 Réglage des paramètres de calcul

Il faut garder à l'esprit que le critère QIEQP est calculé en vue d'une optimisation. Pour nos besoins, nous avons pensé raisonnable de limiter le temps de calcul à 1 s environ. Il est évident que les valeurs des paramètres numériques permettant de vérifier cette contrainte dépendent fortement du type de machine sur lequel le calcul est implanté. On pourrait également envisager une contrainte moins forte. Dans tous les cas, les méthodes et les remarques de cette section restent valables.

**Discrétisation et valeurs propres.** Un premier paramètre à régler pour le compromis précision/temps de calcul est le nombre  $N_d$  de points de discrétisation de l'intégrale  $\int r^2$ .  $N_d$  détermine la taille de la matrice de covariance (matrice carrée d'ordre  $N_d + p$ ). Il entre donc en ligne de compte pour le temps de calcul de celle-ci, mais également sur le temps de calcul de ses valeurs propres, et par conséquent celui de la fonction caractéristique.

Un des facteurs à prendre en compte pour régler  $N_d$  est la taille de la mémoire du calculateur, qui limite la taille des matrices manipulées pendant le calcul (notamment  $\Sigma_g$ ). Avec le calculateur utilisé, il est nécessaire de limiter  $N_d$  à quelques milliers pour

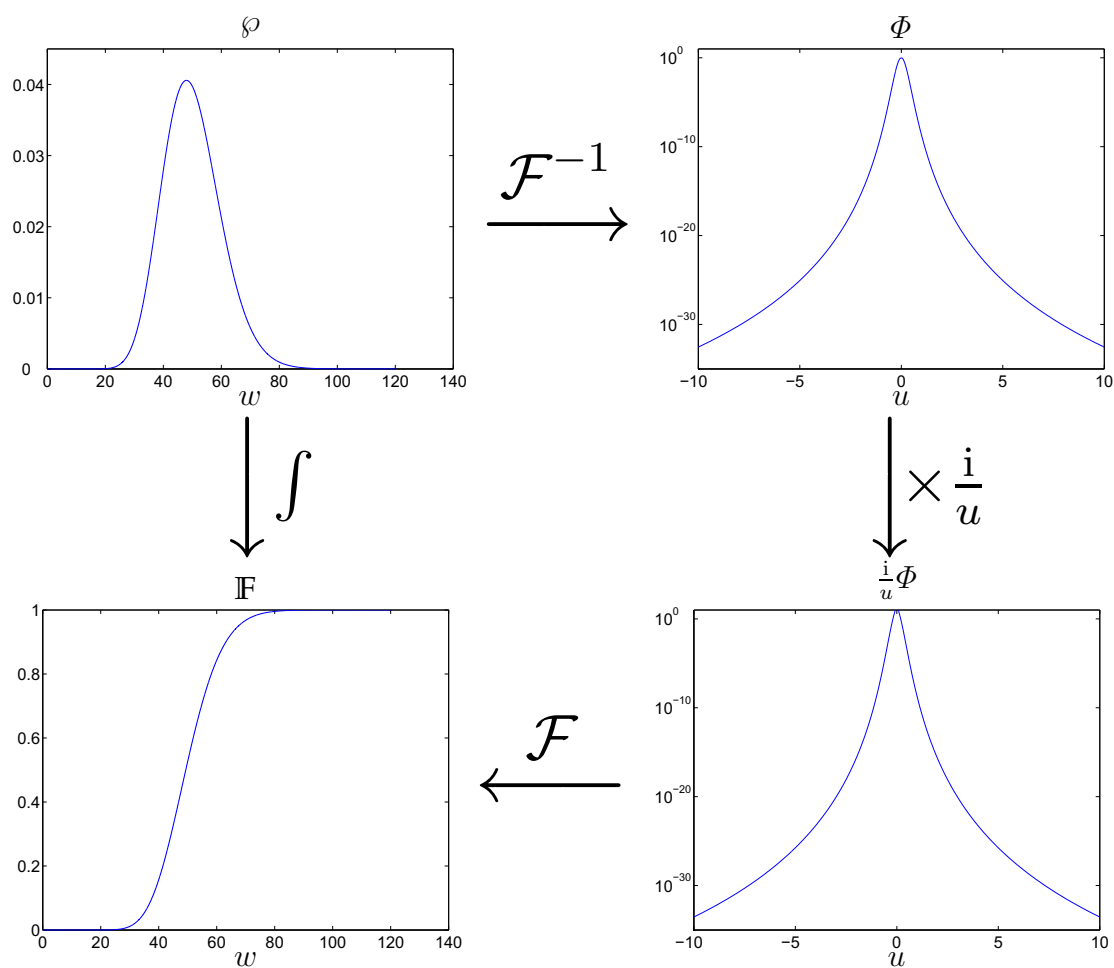


FIG. 4.1 – Principe du calcul de la fonction de répartition  $\mathbb{F}$  à partir de la fonction caractéristique  $\Phi$ . (Exemple d'un  $\chi^2$  à 50 degrés de liberté.)

ne pas saturer la mémoire. Le calcul de la matrice de covariance est déjà long pour de telles valeurs de  $N_d$ . Pour  $N_d = 2000$  par exemple, il dure environ 2 s. Le temps de calcul des  $N_d$  valeurs propres correspondantes est prohibitif (environ 90 s). On peut toutefois envisager de ne calculer que les  $N_{vp}$  plus grandes pour  $N_{vp} < N_d$ . Une analyse des valeurs propres révèle en effet leur décroissance rapide, et au-delà d'un certain rang, leur valeur n'est plus significative. Comme nous le verrons plus loin dans cette section, la vitesse de décroissance dépend en fait de la corrélation entre les  $g_k$ , essentiellement caractérisée par la distance de corrélation  $\lambda$  : plus  $\lambda$  est faible, moins la corrélation est forte et moins la décroissance des valeurs propres est rapide.

La figure 4.2 présente les valeurs propres normalisées  $\tilde{\Lambda}_k = \Lambda_k / \max_k \Lambda_k$  pour l'exemple suivant :

$$s = 1, \quad n = 3, \quad d = 2, \quad \alpha = 0.5, \quad \lambda = 0.1, \quad \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^{\mathcal{Q}} = \{0, \pm 0.8742\}. \quad (4.3)$$

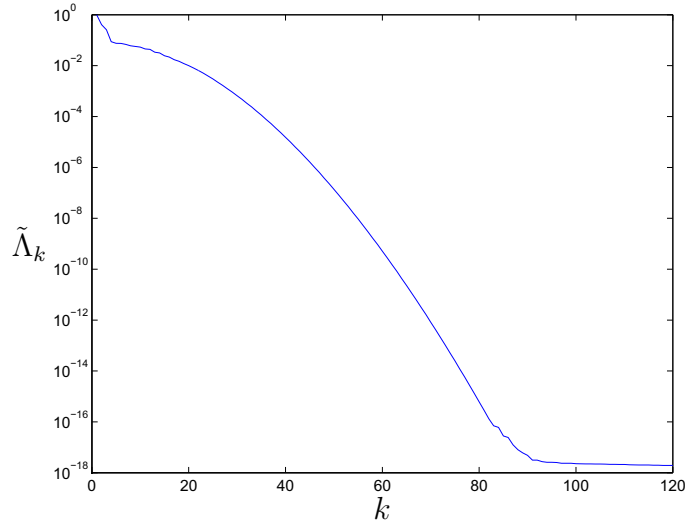


FIG. 4.2 – Valeurs propres normalisées  $\tilde{\Lambda}_k = \Lambda_k / \max_k \Lambda_k$  de la matrice  $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g}}$  pour l'exemple (4.3). Ne sont représentées que les 120 plus grandes valeurs propres.

On voit dans ce cas que seules les 80 premières valeurs propres sont significatives, les suivantes étant inférieures à la précision relative du calculateur ( $\sim 10^{-16}$ ). Ne calculer que les 80 premières valeurs propres amène un gain considérable en temps de calcul : celui-ci passe de 90 s à 3.2 s, soit une réduction pratiquement d'un facteur 30. Dans ces conditions, le facteur limitant la précision du calcul est  $N_d$ . On peut donc encore réduire  $N_{vp}$  sans perdre en précision.

Afin d'obtenir un temps de calcul satisfaisant, il faut d'abord réduire  $N_d$ . La valeur retenue pour  $N_d$  est 700, qui permet de calculer  $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g}}$  en 0.3 s environ. En comparant les valeurs de quantile obtenues, on estime que la perte de précision relative engendrée par cette diminution de  $N_d$  est de l'ordre de  $10^{-5}$ . Dès lors,  $N_{vp}$  peut aussi être diminué, tant que la perte de précision induite par ce changement reste inférieure à  $10^{-5}$ . Dans le cas de l'exemple (4.3) ci-dessus, la valeur retenue pour  $N_{vp}$  est 50. Avec ces réglages, le calcul des valeurs propres prend 0.3 s environ.

**Paramètres pour la TFD.** Le calcul de la fonction de répartition par TFD nécessite le réglage de deux paramètres :

- le support  $[-u_M; u_M]$  considéré pour la fonction caractéristique,
- la période d'échantillonnage  $\Delta u$  utilisée pour discrétiser cette fonction.

Ces deux paramètres déterminent le nombre  $N_u$  de points de discrétisation de la fonction caractéristique, sur laquelle est appliquée la TFD :  $\frac{2u_M}{\Delta u} + 1$ . En pratique, on utilise l'algorithme FFT pour calculer la TFD,  $N_u$  est donc plus exactement la puissance de 2 immédiatement supérieure à cette valeur :

$$\log_2 N_u = E \left( \log_2 \left( \frac{2u_M}{\Delta u} + 1 \right) \right) + 1.$$

► *Deux conditions.* Choisir un support fini pour la fonction caractéristique revient à la considérer nulle en dehors de cet intervalle. Il convient par conséquent de choisir  $u_M$  assez grand pour que la fonction caractéristique soit suffisamment petite en dehors de l'intervalle :

$$\text{Soit } \epsilon_u, \text{ prendre } u_M \text{ tel que : } |\Phi_{\text{IEQP}}(u)| < \epsilon_u, \quad \forall |u| > u_M. \quad (4.4)$$

Le choix de la période d'échantillonnage  $\Delta_u$  doit quant à lui être fait de manière à limiter le repliement. En appliquant la TFD à la fonction caractéristique discrétisée, on obtient en effet la DDP discrétisée  $\wp_{\text{IEQP}}(w)$  avec repliement pour  $|w| > \Delta_u^{-1}$ . Il convient par conséquent de choisir  $\Delta_u$  assez petit pour que le repliement soit suffisamment faible :

$$\text{Soit } \epsilon_w, \text{ prendre } \Delta_u \text{ tel que : } \int_{\Delta_u^{-1}}^{+\infty} \wp_{\text{IEQP}}(w) dw < \epsilon_w. \quad (4.5)$$

Cela revient à prendre  $\Delta_u^{-1}$  supérieur au quantile d'ordre  $1 - \epsilon_w$ . Pour l'estimation du quantile d'ordre  $\nu = 1 - \epsilon$ , il s'agira alors de choisir  $\epsilon_w$  petit devant  $\epsilon$ .

Le compromis précision/temps de calcul portera finalement sur le choix de  $\epsilon_u$  et  $\epsilon_w$  : plus ces paramètres sont proches de zéro, plus le résultat sera précis, mais plus le calcul sera long.

► *Choix de  $u_M$ .* Pour choisir  $u_M$  de manière à satisfaire la condition (4.4), partons de l'expression du module de la fonction caractéristique. À partir de (4.2), on a

$$|\Phi_{\text{IEQP}}(u)|^2 = \prod_{k=1}^{N_d+p} (1 + 4u^2 \Lambda_k^2)^{-1/2}.$$

On cherche donc  $u_M$  tel que

$$\prod_{k=1}^{N_d+p} (1 + 4u^2 \Lambda_k^2) > \epsilon_u^{-4}, \quad \forall |u| > u_M.$$

En minorant le terme de gauche, on obtiendra une condition suffisante. Ici, chaque facteur  $(1 + 4u^2 \Lambda_k^2)$  peut être minoré par 1 ou par  $4u^2 \Lambda_k^2$ . On peut donc minorer le terme de gauche

par

$$\prod_{k=1}^K 4u^2 \Lambda_k^2 = u^{2K} \left( \prod_{k=1}^K 2\Lambda_k \right)^2,$$

pour n'importe quel  $K$  compris entre 1 et  $N_d + p$ . La condition suffisante devient :

$$\exists K, u_M > \left( \epsilon_u^2 \prod_{k=1}^K 2\Lambda_k \right)^{-1/K}.$$

Afin de minimiser le temps de calcul, il suffit donc de choisir le minimum sur  $K$  :

$$u_M = \min_K \left( \epsilon_u^2 \prod_{k=1}^K 2\Lambda_k \right)^{-1/K}. \quad (4.6)$$

► *Choix de  $\Delta_u$ .* La condition (4.5) sur la période d'échantillonnage  $\Delta_u$  est équivalente à dire que  $\Delta_u^{-1}$  doit être supérieur au quantile d'ordre  $1 - \epsilon_w$  de l'IEQP. On va s'assurer que c'est bien le cas en prenant pour  $\Delta_u^{-1}$  un majorant de ce quantile, le moins large possible afin de minimiser le temps de calcul.

Nous avons approché l'IEQP par une somme de  $N_d + p$  carrés de variables gaussiennes  $g_k$ . Dans le cas où ces gaussiennes seraient iid, de variance  $\sigma_g^2$ , on sait que l'IEQP normalisée suivrait une loi du  $\chi^2$  à  $N_d + p$  degrés de liberté :

$$\frac{\text{IEQP}}{\sigma_g^2} \sim \chi_{N_d+p}^2,$$

dont le quantile d'ordre  $1 - \epsilon_w$  sera noté par  $\mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{N_d+p}^2]$ . Le quantile de l'IEQP serait alors  $\sigma_g^2 \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{N_d+p}^2]$ . Dans le cas contraire extrême où la corrélation est maximale, toutes les  $g_k$  sont proportionnelles entre elles. On définit alors les coefficients de proportionnalités

$$a_k = \frac{g_k}{g_1} = \frac{\sigma_k}{\sigma_1}, \quad 1 \leq k \leq N_d + p,$$

où  $\sigma_k^2$  est la variance de  $g_k$ . L'IEQP devient  $g_1^2 \sum_k a_k^2$ . On retrouve donc une loi du  $\chi^2$  à un seul degré de liberté cette fois-ci :

$$\begin{aligned} \text{IEQP} &\sim \left( \sigma_1^2 \sum_{k=1}^{N_d+p} a_k^2 \right) \chi_1^2 \\ &\sim \left( \sum_{k=1}^{N_d+p} \sigma_k^2 \right) \chi_1^2. \end{aligned}$$

Dans le cas général, la corrélation entre les gaussiennes  $g_k$  est intermédiaire entre ces deux extrêmes. Essayons de voir quelles sont les conséquences de cette corrélation sur la valeur du quantile et comment se situe cette valeur par rapport aux deux cas extrêmes que nous venons d'évoquer.

Puisque la fonction caractéristique de l'IEQP ne dépend que des valeurs propres de la matrice de covariance  $\Sigma_{\mathbf{g}}$ , toute l'information de l'IEQP est contenue dans ces valeurs propres, ce qu'on peut constater formellement en orthogonalisant  $\mathbf{g}$ . En diagonalisant  $\Sigma_{\mathbf{g}} = \mathbf{O}^\top \Delta_{\mathbf{g}} \mathbf{O}$ , on peut définir un vecteur gaussien  $\mathbf{g}_\perp = \mathbf{O} \mathbf{g}$  dont les composantes sont indépendantes deux à deux :  $\text{cov } \mathbf{g}_\perp = \Delta_{\mathbf{g}}$ . Ce vecteur est tel que l'IEQP peut s'écrire  $\mathbf{g}_\perp^\top \mathbf{g}_\perp$ . On en déduit que l'étude de la corrélation des  $g_k$  se fait en étudiant les valeurs propres  $\Lambda_k$ , qui sont les variances des  $g_{\perp k}$ . En particulier, le cas de la corrélation maximale s'écrit  $\text{IEQP} \sim (\sum_k \Lambda_k) \chi_1^2$ . L'idée naturelle est alors d'étudier l'évolution du quantile en fonction de la décroissance des valeurs propres à  $\sum_k \Lambda_k$  constante.

La figure 4.3 montre l'évolution du quantile d'ordre 0.95 de la somme des carrés de 10 variables gaussiennes quand les valeurs propres  $\Lambda_k$  de la matrice de covariance décroissent exponentiellement  $\Lambda_k \propto b^k$  avec la contrainte  $\sum_k \Lambda_k = 1$ , en fonction de  $b$ .

On observe que plus la décroissance est rapide ( $b$  diminue), plus le quantile est grand. Quand  $b$  tend vers 0, le quantile tend vers le quantile du  $\chi^2$  à un degré de liberté, qui est donc un majorant.

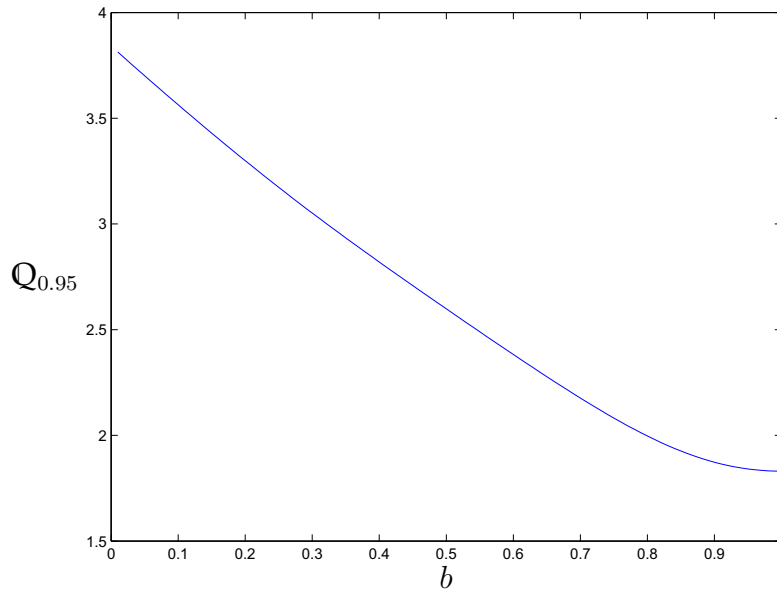


FIG. 4.3 – Quantile d'ordre 0.95 de la somme des carrés de 10 variables gaussiennes pour une décroissance exponentielle des valeurs propres  $\Lambda_k \propto b^k$  avec la contrainte  $\sum_{k=1}^{10} \Lambda_k = 1$ .

Pour en revenir à notre problème, on peut donc majorer le quantile de l'IEQP par  $(\sum_k \Lambda_k) \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_1^2]$ . Cette majoration est toutefois trop large si la décroissance des valeurs propres n'est pas suffisante, et amène donc un temps de calcul inutilement allongé. Dans le cas où la décroissance est très lente, on se rapproche du cas iid, où la matrice de covariance  $\Delta_{\mathbf{g}}$  s'écrit  $\Lambda \mathbf{I}_{N_d+p}$  et le quantile vaut  $\Lambda \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{N_d+p}^2]$ . On peut donc obtenir une majoration moins large, dans le cas d'une décroissance lente, par  $\Lambda_{\max} \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{N_d+p}^2]$ , où  $\Lambda_{\max}$  est la valeur propre maximale.

En pratique, on peut combiner ces deux majorants pour obtenir un majorant global

qui ne soit pas excessivement large. Pour cela, on regroupe les valeurs propres par sous-ensembles  $S_j$  de valeurs « homogènes », par exemple tels que le rapport entre deux valeurs propres d'un même sous-ensemble soit inférieur à 2. Sur chaque sous-ensemble, on peut majorer le quantile par  $\Lambda_{\max}(S_j)\mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{\text{Card}(S_j)}^2]$ , où  $\Lambda_{\max}(S_j)$  est la valeur propre maximale sur l'ensemble  $S_j$ . Dans le cas où tous les  $S_j$  sont de même cardinal, disons  $n_S$ , le majorant global est alors donné par

$$\left( \sum_j \Lambda_{\max}(S_j) \right) \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{n_S}^2].$$

En pratique, les sous-ensembles  $S_j$  ne sont pas tous de même cardinal, mais on peut tout de même supposer que

$$\sum_j \left( \Lambda_{\max}(S_j) \mathbf{Q}_{1-\epsilon_w}[\chi_{\text{Card}(S_j)}^2] \right)$$

est un majorant convenable.

► *Calcul de la TFD par tranches.* Le nombre  $N_u$  de points en entrée de la TFD obtenu par cette méthode peut être important et par conséquent allonger le temps de calcul de la fonction caractéristique et de la TFD. Pour pallier cet inconvénient, on peut choisir de réduire la précision recherchée quand le cas se présente, ce qui peut se faire par la modification de  $\epsilon_u$  et  $\epsilon_w$ . Cela se fait malheureusement sans garantie de résultat ; on peut notamment craindre les effets du repliement.

Une autre manière de faire est de calculer la TFD par tranches, ce qui a pour unique conséquence de réduire le nombre de points en sortie de la TFD, c'est-à-dire le nombre de points de discrétisation de la fonction de répartition. Nous donnons ici le principe de la méthode.

Soit  $\mathbf{f}$  un vecteur de taille  $M$  multiple de la longueur de tranche  $L$  considérée :  $M = KL$ . On souhaite calculer la TFD  $\bar{\mathbf{f}}$  :

$$\bar{f}_i = \sum_{m=1}^M f_m e^{-i2\pi i(m-1)/M}, \quad 1 \leq i \leq M.$$

On introduit le vecteur  $\mathbf{h}$  de taille  $L$  défini par :

$$h_l = \sum_{k=1}^K f_{l+(k-1)L}, \quad 1 \leq l \leq L.$$

En calculant la TFD de  $\mathbf{h}$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \bar{h}_j &= \sum_{l=1}^L h_l e^{-i2\pi j(l-1)/L} \\ &= \sum_{l=1}^L \sum_{k=1}^K f_{l+(k-1)L} e^{-i2\pi j(l-1)/L}. \end{aligned}$$

En multipliant cette expression par  $1 = \exp\{-i2\pi j(k-1)L/L\}$  et en effectuant le changement de variable  $m = l + (k-1)L$ , on trouve :

$$\begin{aligned}\bar{h}_j &= \sum_{m=1}^M f_m e^{-i2\pi j(m-1)/L} \\ &= \sum_{m=1}^M f_m e^{-i2\pi(jK)(m-1)/M} \\ &= \bar{f}_{jK}.\end{aligned}$$

Le vecteur  $\bar{\mathbf{h}}$  contient donc les  $L$  éléments de la TFD  $\bar{\mathbf{f}}$  dont l'indice est un multiple de  $K$ .

Le bénéfice de la méthode est illustré par le tableau 4.1 qui présente le temps de calcul cumulé  $T_c$  de la fonction caractéristique et de la TFD en fonction de la longueur de tranche, pour l'exemple suivant :

$$s = 1, \quad n = 3, \quad d = 2, \quad \alpha = 1, \quad \lambda = 0.8, \quad \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^Q = \{0, \pm 0.7735\}. \quad (4.7)$$

Longueur de tranche	$2^{14}$	$2^{15}$	$2^{16}$	$2^{17}$
Nombre de tranches	5	3	2	1
Temps de calcul $T_c$	0.6 s	0.8 s	1 s	1.2 s

TAB. 4.1 – Temps de calcul cumulé  $T_c$  de la fonction caractéristique et de la TFD pour l'exemple (4.7).

La perte de précision sur le quantile engendrée par cette méthode de calcul provient uniquement de la réduction du nombre de points de discrétisation de la fonction de répartition, qui entraîne une moins bonne précision de l'interpolation. Pour une longueur de tranche  $L$  suffisamment grande, on peut considérer cette imprécision comme négligeable devant celles liées aux autres facteurs évoqués plus haut, tels que la discrétisation de l'intégrale et la troncature des valeurs propres. Pour l'exemple (4.7) ci-dessus, la perte de précision relative sur la valeur du quantile imputable à la réduction de  $L$  de  $2^{17}$  à  $2^{14}$  est de l'ordre de  $10^{-7}$ .

Au contraire, si la longueur de tranche est trop faible, la perte de précision due à l'interpolation sera trop grande. Il convient alors d'imposer une longueur de tranche minimale pour garantir une bonne interpolation.

**Bilan.** Le tableau 4.2 résume les valeurs que nous avons retenues pour les paramètres, les plus adaptées à notre calculateur et aux contraintes imposées.

Terminons par un exemple simple afin de vérifier les performances de la méthode décrite et les comparer à celles obtenues par une estimation de la fonction caractéristique par Monte Carlo. On choisit pour exemple le cas d'un  $\chi^2$  à 50 degrés de liberté (la

$N_d$	$N_{vp}$	$\epsilon_u$	$\epsilon_w$	$L$
700	50	$10^{-7}$	$10^{-7}$	$2^{14}$

TAB. 4.2 – Valeurs retenues pour les paramètres de calcul.

matrice de covariance est la matrice identité d'ordre 50), ce qui nous permet de comparer la fonction de répartition  $\hat{\mathbb{F}}_{\chi_{50}^2}$  estimée à la fonction de répartition théorique donnée par :

$$\mathbb{F}_{\chi_{50}^2}(w) = \int_0^w \frac{t^{24} e^{-t/2}}{2^{25} \Gamma(25)} dt.$$

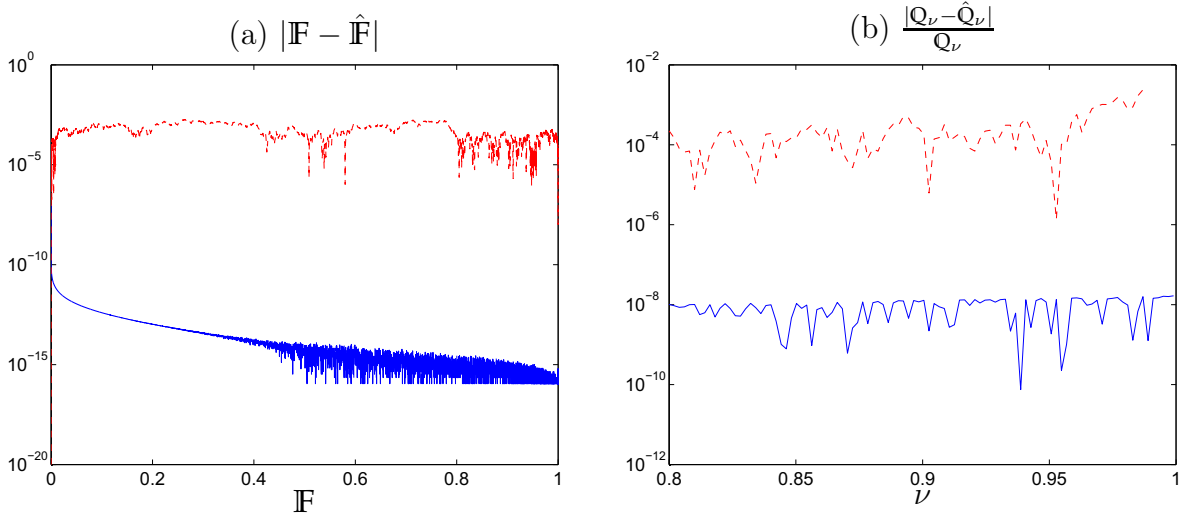


FIG. 4.4 – Comparaison des performances de la méthode proposée à celles d'une estimation par Monte Carlo pour le calcul de la fonction de répartition d'un  $\chi_{50}^2$ . Les courbes continues correspondent à la méthode proposée, les tirets à celle de Monte Carlo. (a) Erreur d'estimation de la fonction de répartition  $|\mathbb{F}_{\chi_{50}^2} - \hat{\mathbb{F}}_{\chi_{50}^2}|$  en fonction de  $\mathbb{F}_{\chi_{50}^2}$ . (b) Erreur relative  $|\mathbb{Q}_\nu - \hat{\mathbb{Q}}_\nu|/\mathbb{Q}_\nu$  obtenue sur la valeur du quantile.

On utilise  $10^5$  réalisations de 50 variables gaussiennes pour la méthode de Monte Carlo, ce qui correspond à un temps de calcul légèrement supérieur à celui de la méthode décrite. La figure 4.4 présente les performances en termes de précision des estimations de la fonction caractéristique et du quantile. L'amélioration obtenue par notre méthode est flagrante, l'erreur relative sur le quantile étant 5 à 6 ordres de grandeur plus faible que pour l'estimation par Monte Carlo.

Pour notre méthode, le maximum de l'erreur d'estimation de la fonction de répartition est de l'ordre de  $10^{-7}$ , obtenu en  $\mathbb{F} = 0$ . Cette erreur est d'ailleurs particulièrement petite, inférieure à  $10^{-13}$ , pour les valeurs intéressantes de l'ordre du quantile, disons supérieures à 75%. L'erreur relative d'estimation du quantile à partir de la matrice de covariance est de l'ordre de  $10^{-8}$ . Elle est donc bien négligeable devant celle introduite par la discrétisation de l'intégrale évoquée tout à l'heure, qui est de l'ordre de  $10^{-5}$ .

## 4.2 Optimisation des critères d'optimalité

### 4.2.1 Introduction

Les problèmes d'optimisation correspondant à la recherche de protocoles exacts sont généralement ardues car les critères à optimiser possèdent de nombreux minima locaux, même pour les plus classiques d'entre eux. Pour une régression polynomiale de degré  $d$  sur un intervalle de  $\mathbb{R}$  par exemple, la recherche d'un protocole  $D$ -optimal à  $n$  points conduit à maximiser le déterminant de la matrice des moments du protocole, qui est un polynôme de degré  $2d$  à  $n$  indéterminées.

Pour résoudre ces problèmes, deux idées générales ont été exploitées dans la littérature :

- utiliser une méthode d'optimisation globale ;
- rechercher dans un premier temps le protocole statistique optimal, puis l'approcher au mieux par un protocole exact.

La deuxième possibilité a été beaucoup utilisée car la convergence d'algorithmes pour l'optimisation du protocole statistique a été prouvée pour les critères classiques, qui sont généralement convexes sur l'ensemble des protocoles statistiques, tandis que la convergence des algorithmes de recherche de protocoles exacts est la plupart du temps une conjecture. Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer aux livres de Walter & Pronzato [5] et Pukelsheim [6].

Nous avons préféré utiliser une méthode d'optimisation globale pour l'optimisation de notre critère, et cela pour plusieurs raisons. D'une part, nous travaillons pour les faibles valeurs de  $n$ , ce qui rend l'approximation d'un protocole statistique optimal délicate, voire inefficace. D'autre part, avec les moyens calculatoires actuels et le développement des méthodes d'optimisation globale, en particulier stochastiques, la recherche d'un protocole exact est une tâche vraisemblablement plus aisée que par le passé. Des méthodes telles que le recuit simulé ou les algorithmes évolutionnaires ont déjà été utilisées dans la littérature (par exemple Angelis & al. [39], Duffull & al. [40], Oyet & Wiens [41] pour le recuit simulé ; Allen, Yu & Schmitz [23] utilisent un algorithme génétique).

Notre choix s'est porté sur l'optimisation par essaim de particules (OEP) pour les raisons suivantes :

- Il s'agit d'une méthode d'optimisation utilisant une population d'individus, donc particulièrement adaptée aux problèmes à grande échelle avec de nombreux minima locaux.
- Par rapport aux autres heuristiques de ce type, telles que les algorithmes génétiques ou les colonies de fourmis, l'OEP est spécialement efficace dans les espaces de recherche continus.
- La mise en œuvre de l'OEP sur nos critères ne pose pas de difficultés particulières. Dans le cas des algorithmes génétiques par exemple, le choix d'une structure de codage pour les individus et d'un opérateur de croisement cohérent avec le codage n'apparaît pas comme trivial. On peut notamment craindre les effets des symétries du problème, qui peuvent avoir pour effet de générer un protocole peu performant à partir de deux individus très performants.

Après une rapide présentation de la méthode générale de l'OEP, nous aborderons les spécificités de son utilisation sur nos critères.

### 4.2.2 Méthode générale d'optimisation par essaim de particules

Nous présentons brièvement le principe de l'OEP. Le lecteur intéressé pourra trouver plus de détails en consultant par exemple Trelea [42].

L'OEP s'appuie sur une population d'agents, les particules, qui parcourent l'espace d'optimisation à la recherche de la position optimale. Les particules ont la faculté de communiquer entre elles et de coopérer pour atteindre l'objectif. La manière dont se déplace une particule d'une itération à l'autre est établie à partir de trois informations :

- son déplacement à l'itération précédente ;
- la meilleure position qu'elle a atteinte dans le passé ;
- la meilleure position déjà atteinte par l'ensemble des particules ;

qui sont combinées grâce à trois coefficients dits *de confiance*.

Formellement, en notant  $P_k$  la position d'une particule à l'itération  $k$ , sa nouvelle position  $P_{k+1}$  est donnée par

$$\begin{cases} P_{k+1} &= P_k + V_{k+1} \\ V_{k+1} &= \kappa_1 V_k + \kappa_2 (B_I - P_k) + \kappa_3 (B_G - P_k) \end{cases}$$

où les  $\kappa_i$  sont les coefficients de confiance,  $B_I$  la meilleure position individuelle de la particule et  $B_G$  la meilleure position globale. Le déplacement  $V_k$  est appelé *vitesse de la particule*.

Les coefficients  $\kappa_2$  et  $\kappa_3$  sont tirés aléatoirement à chaque itération. On prend généralement  $\kappa_3 = 1 - \kappa_2$  avec  $\kappa_2$  tiré selon une loi uniforme sur un intervalle  $[0; a]$ .

L'algorithme est arrêté dès qu'une proportion suffisante des particules atteint une vitesse inférieure à un seuil fixé.

Les paramètres spécifiques pour mettre en œuvre une OEP sont donc les suivants :

- le nombre de particules,
- le coefficient  $\kappa_1$ ,
- la borne supérieure  $a$  de l'intervalle de tirage du coefficient  $\kappa_2$ .

En ce qui concerne les deux derniers points, nous avons retenu les coefficients  $\kappa_1 = 0.6$  et  $a = 1.7$  proposés par Trelea [42] qui nous ont donné des résultats satisfaisants. Le choix du nombre de particules est abordé dans la section suivante, ainsi que d'autres aspects spécifiques de l'optimisation de notre critère.

### 4.2.3 Mise en œuvre pour les critères $\mathcal{T}$ et $\mathcal{Q}$

**Contrainte sur la position des particules.** L'unique contrainte de notre problème d'optimisation est celle sur la position des particules, puisque chaque particule représente

un point du protocole et doit donc rester à l'intérieur du domaine expérimental. Nous avons imposé cette contrainte en remplaçant dans le domaine les particules qui en sortent, à la fin de chaque itération de l'algorithme. Deux stratégies de remplacement ont été testées :

- le rebond non-amorti, c'est-à-dire que la position de la particule après remplacement est la position « miroir » de celle avant remplacement, par rapport aux faces du domaine que la particule a traversée, comme si elle avait « rebondi » sur les parois du domaine ;
- l'amortissement total, c'est-à-dire que la particule est stoppée aux faces du domaine.

La deuxième stratégie s'est avérée la plus efficace, le gain exploratoire potentiel amené par la première étant visiblement très faible, alors qu'un protocole optimal possédant des points sur les faces du domaine est chose courante (voir les figures de la section 3.4.3).

**Procédure d'optimisation couplée.** On peut qualifier l'OEP de méthode d'optimisation à grande échelle, dans le sens où elle permet de trouver rapidement une bonne approximation de l'optimum global. La convergence locale est par contre lente, comme en témoignent les tests de Trelea [42], où la convergence nécessite plus d'évaluations de la fonction-coût quand celle-ci a une courbure plus faible.

Il est donc avantageux de coupler l'OEP à un algorithme de recherche locale : pour un temps de calcul donné, il est préférable, en termes de précision du résultat, de réduire le nombre d'itérations de l'algorithme particulière et de terminer l'optimisation par une recherche locale au moyen d'une méthode classique telle que le simplexe, comme suggéré par Fan & Zahara [43]. Cela se traduit par une réduction de niveau d'exigence du test de convergence de l'OEP, et éventuellement une limitation du nombre d'itérations de celle-ci.

**Choix du nombre de particules.** Concernant le nombre de particules à utiliser, le choix nécessite un compromis. En effet, la probabilité de succès de l'OEP croît avec le nombre de particules utilisées, mais nous avons constaté que cette croissance était très ralentie au-delà d'un certain nombre de particules. Autrement dit, le coût calculatoire pour augmenter sensiblement la probabilité de succès par augmentation du nombre de particules peut être important.

Une autre stratégie consiste à répéter la procédure d'optimisation plusieurs fois avec un nombre de particules plus faible et à garder le meilleur résultat. Afin d'optimiser la probabilité de réussite globale par rapport au temps de calcul, un compromis est à faire entre le nombre de particules et le nombre de répétitions de la procédure. Pour le critère  $\mathcal{Q}$  sur un domaine de dimension  $s = 1$  par exemple, une dizaine de particules et trois répétitions de la procédure donne des résultats satisfaisants.

#### 4.2.4 Mise en œuvre pour le critère $\mathcal{M}_2^T$

L'optimisation du critère  $\mathcal{M}_2^T$  est plus complexe, puisque l'estimation du critère nécessite elle-même la minimisation de l'efficacité sur l'ensemble sélectionné des valeurs pour

les hyperparamètres  $(\tilde{\alpha}, \lambda)$ .

Le calcul de l'efficacité, dont la définition fait intervenir la valeur optimale  $\mathcal{T}^*$ , nécessite a priori lui aussi l'optimisation du critère  $\mathcal{T}$ . Toutefois, comme annoncé à la section 3.5.2, afin d'éviter des temps de calcul prohibitifs, le caractère continu de  $\mathcal{T}^*$  par rapport aux hyperparamètres permet d'envisager une estimation de  $\mathcal{T}^*$  par interpolation.

On peut se contenter d'une OEP simple pour la minimisation de l'efficacité, le couplage avec une recherche locale n'apporte pas d'amélioration sensible du résultat. Il est en revanche préférable d'utiliser la procédure d'optimisation complète décrite à la section précédente pour maximiser  $\mathcal{M}_2^T$  par rapport à  $\xi$ .

**Discrétisation de l'espace des hyperparamètres.** Pour le calcul de  $\mathcal{T}^*$ , on se retrouve à nouveau face à un problème d'estimation. Le bruit d'observation correspond ici à l'erreur due à l'optimisation numérique de  $\mathcal{T}$  pour le calcul de  $\mathcal{T}^*$ . Sous réserve que l'optimisation ne soit pas trop mauvaise, cette erreur peut être considérée négligeable relativement à la valeur de  $\mathcal{T}^*$ . On envisage donc une interpolation. La méthode d'interpolation retenue est celle des splines cubiques, qui permet une estimation à la fois rapide et satisfaisante au sens qu'elle respecte les a priori de croissance et de décroissance monotone sur les différents domaines de valeurs pour les hyperparamètres, comme le montrent les courbes de  $\mathcal{T}^*$  en fonction de  $\tilde{\alpha}$  et  $\lambda$  sur la figure 4.5. Les a priori de monotonie sont importants afin d'éviter que l'efficacité ne soit excessivement surestimée.

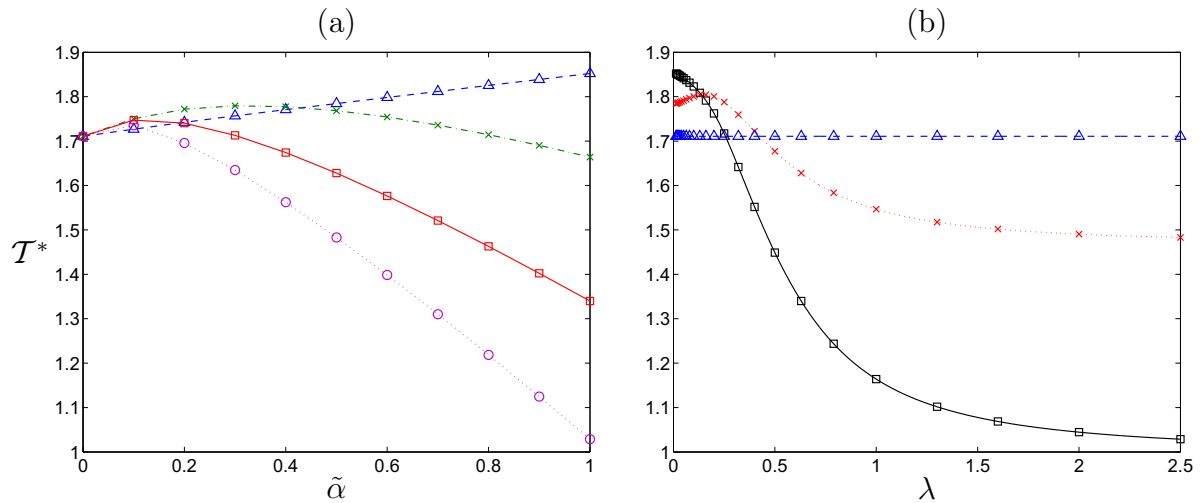


FIG. 4.5 – Variations de  $\mathcal{T}^*$  en fonction des hyperparamètres. (a) Courbes en fonction de  $\tilde{\alpha}$  à  $\lambda$  fixé :  $\Delta$  ( $\lambda = 0.013$ ),  $\times$  ( $\lambda = 0.3$ ),  $\square$  ( $\lambda = 0.63$ ),  $\circ$  ( $\lambda = 2.5$ ). (b) Courbes en fonction de  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha}$  fixé :  $\Delta$  ( $\tilde{\alpha} = 0$ ),  $\times$  ( $\tilde{\alpha} = 0.5$ ),  $\square$  ( $\tilde{\alpha} = 1$ ).

Le choix des points où  $\mathcal{T}^*(\tilde{\alpha}, \lambda)$  doit être calculée par optimisation peut relever de la planification d'expériences. Ici, un raisonnement qualitatif paraît suffisant.

On choisit en premier lieu de faire un quadrillage complet en  $(\tilde{\alpha}, \lambda)$ , c'est-à-dire que les points d'observation correspondent à la totalité des  $\mathcal{T}^*(\tilde{\alpha}_i, \lambda_j)$ , ( $1 \leq i \leq N_{\tilde{\alpha}}, 1 \leq j \leq N_{\lambda}$ ),

pour une discrétisation  $\tilde{\alpha} = [\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_{N_{\tilde{\alpha}}}]$  en  $\tilde{\alpha}$  et  $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{\lambda}}]$  en  $\lambda$ . Notons au passage que pour  $\tilde{\alpha} = 0$ , le critère est indépendant de  $\lambda$  et qu'il suffit donc de faire le calcul pour une seule valeur de  $\lambda$ .

L'interprétation de  $\lambda$  comme paramètre d'échelle inspire une répartition des  $\lambda_j$  équitable entre les petites valeurs, les valeurs moyennes et les grandes (voir Jourdan & Collobrier [31]), ce qui suggère une progression géométrique des  $\lambda_j$ . Avec une méthode d'interpolation locale telle que les splines, il paraît par ailleurs judicieux de concentrer les points d'observation dans les zones de variations rapides de  $\mathcal{T}^*$ , afin de suivre au mieux ces variations. Au vu des courbes de la figure 4.5(b), ces deux constats sont en accord, et une discrétisation exponentielle en  $\lambda$  est choisie :  $\lambda_{j+1} = \beta \lambda_j, \beta > 0$ . Les valeurs des  $\lambda_j$  sont donc fixées dès que l'intervalle  $[\lambda^-; \lambda^+]$  et le nombre de points sont choisis. Pour 11 points répartis sur  $[0.1; 1]$  par exemple, on obtient :

$$\boldsymbol{\lambda} = [0.10, 0.13, 0.16, 0.20, 0.25, 0.32, 0.40, 0.50, 0.63, 0.79, 1.00].$$

En ce qui concerne  $\tilde{\alpha}$ , les variations de  $\mathcal{T}^*$  en fonction de  $\tilde{\alpha}$  (figure 4.5(a)) suggèrent qu'on peut se contenter d'une discrétisation linéaire : 11 points équirépartis sur  $[0; 1]$   $\tilde{\alpha}_i = (i - 1)/10$  s'avèrent suffisants.

**Réduction de l'espace de minimisation de l'efficacité.** Nous avons mentionné à la section 3.5.2 le fait que le minimum de l'efficacité d'un protocole était souvent réalisé pour les valeurs extrêmes des hyperparamètres et plus précisément

- soit pour  $\tilde{\alpha} = 0$ ;
- soit pour  $(\tilde{\alpha} = 1, \lambda = \lambda^+)$ .

Si cette propriété était vérifiée pour tout protocole, elle permettrait de réduire considérablement le temps de calcul du critère  $\mathcal{M}_2^T$  puisque la minimisation de l'efficacité se ferait sur un ensemble à seulement deux éléments au lieu d'un espace continu. L'exemple suivant montre toutefois que même des protocoles très performants pour le critère  $\mathcal{M}_2^T$  ne vérifient pas forcément cette propriété.

Plaçons-nous dans le cas  $s = 1, n = 4, d = 2$ , et calculons le critère  $\mathcal{M}_2^T$  pour  $0 \leq \tilde{\alpha} \leq 1$  et  $0.013 \leq \lambda \leq 3.2$ . Le protocole  $\boldsymbol{\xi}^{\text{test}} = \{-0.8911, -0.2659, 0.1972, 0.8550\}$  atteint son minimum d'efficacité  $\mathcal{M}_2^T(\boldsymbol{\xi}^{\text{test}}) = 0.8283$  pour  $(\tilde{\alpha} = 1, \lambda = 1.64 \neq \lambda^+)$  (pour comparaison, on rappelle que la valeur optimale vaut  $\mathcal{M}^* = 0.8321$ ). La figure 4.6 montre effectivement la courbe d'efficacité du protocole en fonction de  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha} = 1$  fixé.

Compte tenu de l'existence de tels exemples de protocole, il paraît hasardeux de réaliser la minimisation de l'efficacité sur deux points malgré le gain en temps de calcul. En employant une telle méthode d'optimisation, on risque en effet d'aboutir à des protocoles non optimaux tels que  $\boldsymbol{\xi}^{\text{test}}$ , dont l'efficacité minimisée sur deux points est supérieure à la valeur optimale  $\mathcal{M}^*$  mais dont l'efficacité minimale est en réalité inférieure à celle du protocole  $\mathcal{M}_2^T$ -optimal.

Les protocoles  $\mathcal{M}_2^T$ -optimaux paraissent pour leur part avoir la propriété d'atteindre leur minimum d'efficacité *simultanément* pour  $\tilde{\alpha} = 0$  et  $(\tilde{\alpha} = 1, \lambda = \lambda^+)$  :

$$\mathcal{M}^* = \mathcal{E}_{\mathcal{T}(0)}(\boldsymbol{\xi}^{T^*}) = \mathcal{E}_{\mathcal{T}(1, \lambda^+)}(\boldsymbol{\xi}^{T^*}).$$

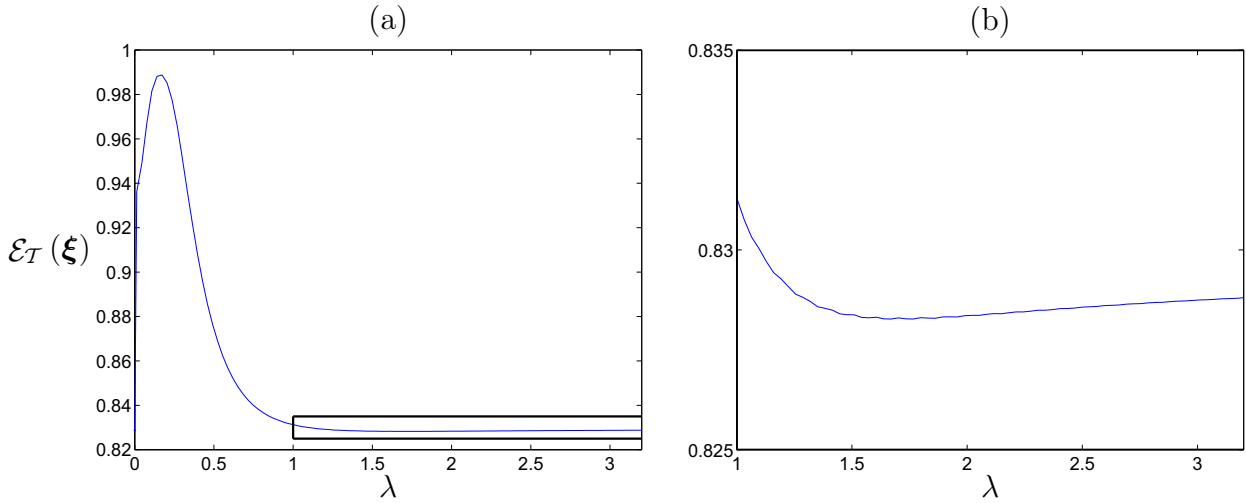


FIG. 4.6 –  $\mathcal{T}$ -efficacité du protocole  $\xi$  en fonction de  $\lambda$  à  $\tilde{\alpha} = 1$  fixé. La courbe (b) est un zoom de (a).

Cette propriété renforce l'idée intuitive selon laquelle les protocoles  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$ -optimaux réalisent le meilleur compromis possible entre les deux extrêmes (section 3.5.2).

### 4.3 Conclusion

Plusieurs questions d'ordre numérique ont été résolues.

Nous avons en premier lieu développé une méthode de calcul du quantile de l'IEQP qui répond aux exigences d'une optimisation numérique en termes de temps de calcul avec les moyens actuels, tout en garantissant une précision satisfaisante sur le résultat. Fondée sur l'expression analytique de la fonction caractéristique, cette méthode s'applique pour toute somme de carrés de variables aléatoires gaussiennes centrées, corrélées ou non.

Les paramètres permettant le réglage du compromis précision/temps de calcul ont été clairement identifiés. Ces paramètres correctement réglés, notre méthode a les avantages suivants sur une méthode de Monte Carlo (à temps de calcul équivalent) :

- biais beaucoup plus faible (5 à 6 ordres de grandeur) ;
- variance nulle.

L'optimisation des critères proposés a également nécessité un travail d'analyse. La mise en œuvre d'une procédure d'optimisation par essaim de particules couplée à une recherche locale a permis l'obtention des protocoles optimaux au sens des critères  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$  pour une large étendue de valeurs des hyperparamètres.

L'optimisation du critère  $\mathcal{M}_2^{\mathcal{T}}$  de type maximin sur l'efficacité, qui permet la suppression de la dépendance envers les hyperparamètres  $\tilde{\alpha}$  et  $\lambda$  dans le cas où l'a priori est diffus, a été rendue possible en un temps raisonnable par l'utilisation d'une interpolation de la valeur optimale du critère  $\mathcal{T}$ . Ce procédé ne suffit pas pour l'optimisation du critère

$\mathcal{M}_2^Q$  dont la charge calculatoire reste trop importante. On pourrait toutefois envisager d'obtenir un résultat approché en exploitant l'idée proposée pour la réduction de l'espace de minimisation de l'efficacité.

## Chapitre 5

# Application

Ce chapitre présente une possibilité d'utilisation sur un exemple concret de la méthodologie et des outils développés, dans le cadre d'une application de type instrumentation : il s'agit de l'optimisation d'un instrument de mesure de débit.

## 5.1 Débitmétrie par vélocimétrie laser

Différents principes de mesure sont utilisés en débitmétrie, selon la nature du fluide, les contraintes environnementales, etc. Un de ces principes est la vélocimétrie laser : par effet Doppler ou interférométrie, il est possible grâce à un laser de mesurer une composante de la vitesse d'une particule (ou une bulle) en mouvement dans un fluide. En mesurant ainsi la vitesse du fluide en plusieurs points d'un même plan de coupe, on peut estimer la valeur du débit. Le choix de la position des capteurs apparaît crucial pour la performance de l'instrument. Une démarche de planification d'expériences semble pertinente pour s'attaquer à ce problème. Nous allons présenter de quelle façon elle est réalisable.

## 5.2 Formulation du problème et connaissance a priori

On cherche à établir la configuration spatiale des points de mesure de vitesse, qui permettra la meilleure estimation possible du débit par interpolation puis intégration du profil de vitesse. La fonction cible est donc ici la vitesse du fluide, et on la notera  $v$ . Nous nous intéressons au cas couramment rencontré d'un fluide en transit dans une canalisation de section circulaire.

Pour garantir la faisabilité d'un instrument dans cette situation, il est raisonnable de se limiter à un nombre assez faible de capteurs, typiquement moins d'une dizaine. Pour les instruments existants, des contraintes sont par ailleurs généralement imposées sur le positionnement de l'instrument le long de la conduite par rapport aux singularités de celle-ci (coudes, etc.), ce afin de garantir la performance de l'estimation du débit. Ce type d'instrument est en effet peu robuste vis-à-vis des hypothèses faites sur la forme du profil de vitesse, à cause de la difficulté à modéliser de manière simple mais précise le profil aux abords (amont et aval) des singularités de conduite. La forme du profil  $y$  est en effet fortement perturbée, avec une variété relativement grande de perturbations selon le type de singularité rencontrée et la distance du plan de coupe par rapport à celle-ci. Nous pensons que notre démarche peut apporter une solution à ce problème, en permettant de rendre l'instrument robuste aux erreurs structurelles de reconstruction du profil, et ainsi de se libérer des contraintes imposées, qui ne sont la plupart du temps pas respectées.

L'intérêt de la représentation statistique est mis en exergue ici, dans le sens où la disparité des erreurs structurelles correspondant aux diverses singularités de conduite semble difficilement caractérisable par un modèle de régression simple. Il est par contre assez aisé, comme nous le verrons en section 5.4, d'obtenir une caractérisation statistique à partir de données issues de codes aux éléments finis qui constituent une connaissance a priori précieuse.

Nous disposons en effet de profils de vitesse calculés par simulation pour plusieurs conduites contenant une singularité de type coude, et pour deux valeurs du débit : 1.6 et 8 m<sup>3</sup>/s. Les singularités sont : trois coudes à 30°, 60° et 90°, un double coude (deux coudes successifs) coplanaire, et un double coude non coplanaire. Pour chaque conduite et chaque débit, de 250 à 300 profils ont été calculés à intervalle régulier le long de la conduite, entre

deux plans situés à une distance de plusieurs fois le diamètre en amont et en aval de la singularité. Chaque profil est constitué de 909 nœuds (points où la composante débitante de la vitesse est calculée) pris sur une grille cartésienne. On notera ces nœuds  $(M_i)_{1 \leq i \leq 909}$  et on appellera « protocole complet » le protocole  $\xi$  constitué par l'ensemble de ces points.

Nous allons utiliser cet a priori pour nous aider dans le choix des fonctions de régression et de la fonction moment d'ordre deux du processus gaussien modélisant l'erreur structurelle.

### 5.3 Choix des fonctions de régression

L'approximation des profils de vitesse dans une conduite est un sujet délicat (voir Fleury [44]), surtout aux abords des singularités de conduite. Les modèles phénoménologiques ne donnent généralement pas les meilleurs résultats car il est difficile d'obtenir des modèles précis du fait de la complexité des phénomènes physiques mis en jeu. On peut ajouter dans notre cas que le nombre limité de paramètres estimables (de par le faible nombre de capteurs disponibles), conjugué à la diversité des situations présentées par les irrégularités, ne plaide pas en faveur de ce type de modèles. Cette remarque est aussi valable pour les modèles comportementaux — d'où la nécessité d'adopter une démarche robuste telle que la nôtre — mais ceux-ci ont l'avantage de faciliter le traitement.

La principale particularité des profils de vitesse est leur forte décroissance à la périphérie, due aux frottements sur les parois de la conduite. La plupart des modèles utilisés classiquement tendent à reproduire au mieux ce comportement, et sont généralement non linéaires par rapport aux paramètres, ce qui, comme nous l'avons déjà évoqué dans les chapitres précédents (voir section 1.2.2), amène des difficultés du point de vue de la planification d'expériences. Une démarche séquentielle n'est en particulier pas envisagée ici puisqu'on suppose les positions des capteurs fixées une fois pour toutes. On trouve toutefois dans la littérature [44] un modèle LP dépendant de trois paramètres  $(a_0, a_1, a_2)$  :

$$f(\mathbf{x}) = a_0(1 + a_1 \log_{10}(1 - \frac{\rho_{\mathbf{x}}}{R}) + a_2(1 - \frac{\rho_{\mathbf{x}}}{R})),$$

$\rho_{\mathbf{x}} \in [0; R]$  étant la coordonnée radiale de  $\mathbf{x}$ , et  $R = 0.5$  m le rayon de la conduite.

Dans le cas général, cette fonction présente une dérivée non nulle en  $\rho = 0$ , ce qui est indésirable. On peut cependant imposer une tangente horizontale à l'origine en utilisant la contrainte  $a_1 = -a_2 \ln 10$ . On obtient alors deux fonctions de régression radiales, la fonction unité d'une part, et d'autre part ce que nous appellerons la fonction lin-log  $f_{LL}$  :

$$f_{LL}(\mathbf{x}) = \frac{\rho_{\mathbf{x}}}{R} + \ln(1 - \frac{\rho_{\mathbf{x}}}{R}). \quad (5.1)$$

Ces fonctions ne dépendent que de la coordonnée radiale, et sont donc à symétrie de révolution, ce qui n'est pas le cas des profils de vitesse aux abords d'une singularité de conduite. Afin de tenir compte des variations angulaires du profil, il convient d'ajouter des

fonctions de régression qui dépendent de la coordonnée angulaire  $\varphi_{\mathbf{x}} \in ]-\pi; \pi]$ . Fleury [44] propose pour cela de multiplier les fonctions radiales par la fonction

$$g(\mathbf{x}) = 1 + u\rho_{\mathbf{x}} \cos(\varphi_{\mathbf{x}} - \varphi_0)$$

paramétrée par  $(u, \varphi_0)$ . En développant  $\cos(\varphi_{\mathbf{x}} - \varphi_0) = \cos(\varphi_0) \cos(\varphi_{\mathbf{x}}) + \sin(\varphi_0) \sin(\varphi_{\mathbf{x}})$ , on remarque qu'il est équivalent d'utiliser un polynôme complet d'ordre 1

$$g_{pol}(\mathbf{x}) = 1 + b_1 x_{\{1\}} + b_2 x_{\{2\}}, \quad (5.2)$$

$x_{\{1\}} = \rho_{\mathbf{x}} \cos(\varphi_{\mathbf{x}})$  et  $x_{\{2\}} = \rho_{\mathbf{x}} \sin(\varphi_{\mathbf{x}})$  étant les coordonnées cartésiennes de  $\mathbf{x}$ . La formulation polynomiale a l'avantage de résoudre le problème de non-linéarité par rapport à  $\varphi_0$ . L'équivalence des deux paramétrisations est établie par

$$ue^{i\varphi_0} = b_1 + ib_2.$$

Les fonctions linéaires correspondant à la partie angulaire (5.2) sont donc au nombre de trois : la fonction unité, et les fonctions de projection sur les axes cartésiens  $x_{\{1\}}$  et  $x_{\{2\}}$ .

En multipliant deux à deux les fonctions radiales et les fonctions de la partie angulaire, on obtient finalement six fonctions de régression :

$$\begin{aligned} \phi_1(\mathbf{x}) &= 1 & \phi_4(\mathbf{x}) &= f_{LL}(\mathbf{x}) \\ \phi_2(\mathbf{x}) &= x_{\{1\}} & \phi_5(\mathbf{x}) &= x_{\{1\}} f_{LL}(\mathbf{x}) \\ \phi_3(\mathbf{x}) &= x_{\{2\}} & \phi_6(\mathbf{x}) &= x_{\{2\}} f_{LL}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

qui constituent le vecteur noté  $\phi_{LL}(\mathbf{x})$ .

Une autre idée pour tenir compte de la décroissance à la périphérie est de prendre comme fonction de régression le profil de vitesse en conduite rectiligne, qui est à symétrie de révolution et dont on dispose dans les données a priori (il suffit de prendre un profil à une distance suffisamment grande d'une singularité). En remplaçant la fonction lin-log par ce profil, noté  $f_{PB}(\mathbf{x})$ , dans les fonctions de régression présentées ci-dessus, on obtient un nouveau jeu de fonctions de régression possibles, qui constituent le vecteur noté  $\phi_{PB}(\mathbf{x})$ . Nous adoptons une démarche totale pour la sélection du meilleur jeu de fonctions, c'est-à-dire que nous retiendrons celui qui donne la meilleure performance possible, pour le protocole optimal correspondant. Nous verrons les résultats en section 5.6.

On considérera également d'autres options. En effet, il peut être pertinent de réduire le nombre de fonctions de régression, afin qu'il soit strictement inférieur au nombre de paramètres de régression. On se contentera par exemple de ne retenir que les quatre premières fonctions de régression, ce qui donne deux nouveaux vecteurs de fonctions notés  $\phi_{LLR}$  et  $\phi_{PBR}$ , correspondant respectivement à la diminution de  $\phi_{LL}$  et  $\phi_{PB}$ .

Une fois les fonctions de régression choisies, les données a priori vont permettre d'estimer la fonction moment d'ordre deux de l'erreur structurelle. Il ne s'agit effectivement pas ici de la fonction de covariance car l'erreur structurelle n'est pas d'espérance nulle. Le traitement reste cependant inchangé car nous considérons des erreurs quadratiques moyennes, pour lesquelles le caractère centré est indifférent. Par souci de clarté et de concision, et puisqu'il n'y a pas de risque de confusion, le terme moment désigne implicitement par la suite le moment d'ordre deux.

## 5.4 Fonction moment d'ordre deux de l'erreur structurale

Avant d'aborder la méthode employée pour cette estimation, il nous faut préciser un point important. Le format des données a priori suppose implicitement la connaissance de l'orientation de la singularité par rapport aux axes du plan de coupe de la conduite. Cela est bien naturel, mais en désaccord avec notre objectif, qui est celui d'une robustesse la plus grande possible. Il convient de s'affranchir de cette hypothèse. Cela revient à considérer la fonction moment invariante par rotation autour du centre du domaine : deux points auront un moment indépendant de leurs positions angulaires absolues, mais dépendant uniquement de leur position relative, c'est-à-dire leur distance angulaire. Formellement, la fonction moment dépend alors de trois paramètres :

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = c(\rho_{\mathbf{x}}, \varphi_{\mathbf{x}}, \rho_{\mathbf{x}'}, \varphi_{\mathbf{x}'}) = c(\rho_{\mathbf{x}}, \rho_{\mathbf{x}'}, \varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'}), \quad (5.3)$$

où  $\varphi_{\mathbf{x}}, \varphi_{\mathbf{x}'}$  désignent les coordonnées angulaires respectives des points  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x}'$ , et  $\varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} = |\varphi_{\mathbf{x}} - \varphi_{\mathbf{x}'}|$  leur distance angulaire.

Ceci étant dit, on pourrait être tenté d'opérer par séparation des variables, et de considérer des fonctions paramétriques typiquement utilisées dans ce genre de situation, en estimant leurs paramètres à partir des données a priori. Nous pensons pour notre part que cette méthode ne permet pas de bénéficier de l'intégralité de l'information contenue dans ces données. À cet égard, le choix de la fonction paramétrique la plus à même de retenir le maximum d'information disponible, tout en satisfaisant la contrainte d'invariance (5.3), s'avère délicat. La difficulté à affronter, qui justifie habituellement l'emploi des fonctions classiques est celui de la nécessité d'obtenir une fonction de type positif.

Nous avons pu constater qu'une méthode d'estimation simple permettait de satisfaire cette propriété. L'idée est que l'on peut calculer de manière relativement précise le moment pour un couple de points  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  simplement en moyennant les produits  $r(\mathbf{x})r(\mathbf{x}')$  sur l'ensemble des profils disponibles a priori :

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{N_c} \sum_{k=1}^{N_c} \hat{r}_k(\mathbf{x}) \hat{r}_k(\mathbf{x}'), \quad (5.4)$$

$N_c$  étant le nombre de profils et  $\hat{r}_k = v - \hat{v}_M$  l'estimation de l'erreur structurale pour le  $k$ -ième profil, établie à partir du prédicteur  $\hat{v}_M$  pour le protocole complet  $\{M_i, 1 \leq i \leq 909\}$ . La fonction  $c$  calculée de cette manière est de type positif (voir ci-dessous) mais ne respecte pas la propriété d'invariance (5.3). Pour remédier à cela, on cherche à « moyenner » sur les couples de points à même distance angulaire :

$$c(\rho_{\mathbf{x}}, \rho_{\mathbf{x}'}, \varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \hat{r}_k(\rho_{\mathbf{x}}, \varphi) [\hat{r}_k(\rho_{\mathbf{x}'}, \varphi + \varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'}) + \hat{r}_k(\rho_{\mathbf{x}'}, \varphi - \varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'})] d\varphi$$

En pratique, cette intégrale est discrétisée, et il est nécessaire d'utiliser une grille polaire  $(P_i)_{1 \leq i \leq N_P}$  sur laquelle on estime le moment par la méthode décrite. Le moment pour

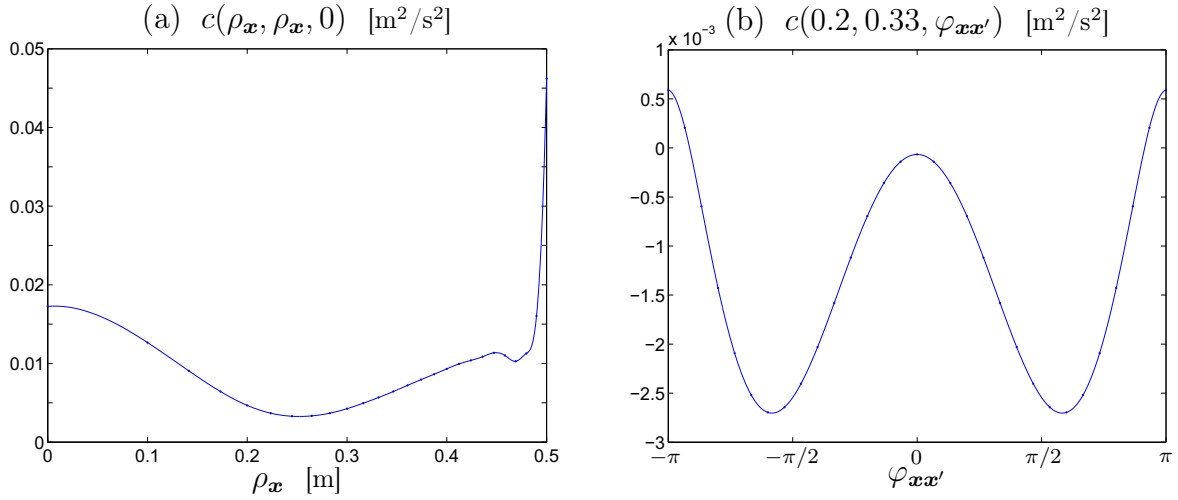


FIG. 5.1 – Moment d'ordre deux : (a) en fonction de  $\rho_x$  quand  $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$ , (b) en fonction de  $\varphi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'}$  à  $\rho_x = 0.2$  m et  $\rho_{\mathbf{x}'} = 0.33$  m fixés.

n'importe quel couple de points est ensuite déduit par interpolation au moyen de splines. La figure 5.1 présente le résultat obtenu pour une régression avec  $\phi = \phi_{LL}$ .

Nous avons de bonnes raisons de penser que la fonction  $c$  obtenue est de type positif. En effet, la formule (5.4) peut se mettre sous la forme du produit scalaire

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{N_c} \mathbf{r}^\top(\mathbf{x}) \mathbf{r}(\mathbf{x}'),$$

où  $\mathbf{r}$  est le vecteur  $N_c \times 1$  des  $\hat{r}_k$ . Pour la grille  $(P_i)_{1 \leq i \leq N_P}$  utilisée, la matrice des moments correspondant s'écrit alors

$$\mathbf{C}_{N_P} = \frac{1}{N_c} \mathbf{R}^\top \mathbf{R},$$

avec  $\mathbf{R}$  la matrice  $N_c \times N_P$  de terme général  $R_{ij} = \hat{r}_i(P_j)$ ;  $\mathbf{C}_{N_P}$  est donc semi-définie positive. L'opération de moyennage pour satisfaire la propriété d'invariance (5.3) peut également être intégrée dans cette formulation en remarquant que cette opération est équivalente à l'ajout de profils par rotation/symétrie dans la formule (5.4). La matrice des moments de l'erreur structurale sur la grille obtenue au bout de la démarche est par conséquent semi-définie positive, ce qui est une condition nécessaire pour que  $c$  soit de type positif.

Ce n'est toutefois pas une condition suffisante, puisque la fonction  $c$  est calculée au final par interpolation. On vérifie tout de même sur une grille de taille plus importante que les valeurs propres de la matrice des moments restent positives. Les valeurs propres obtenues sont effectivement positives à l'exception de valeurs propres négligeables (de l'ordre de  $10^{-15}$  devant la valeur propre dominante de l'ordre de 10).

Pour garantir le type positif, on pourrait imaginer interpoler les  $\hat{r}_k$  plutôt que  $c$ , la procédure décrite ci-dessus assurant dans ce cas la semi-définie positivité de la matrice des moments pour n'importe quel protocole. Mais on se heurte alors au problème d'un temps de calcul excessivement allongé.

**REMARQUE.** La fonction moment est estimée à partir des profils correspondants à un seul débit. Nous avons pu constater que les moments estimés pour  $Q = 1.6 \text{ m}^3/\text{s}$  et  $Q = 8 \text{ m}^3/\text{s}$  étaient quasiment identiques à un facteur multiplicatif près. Ce facteur de proportionnalité peut être considéré comme un hyperparamètre dont vont dépendre les protocoles optimaux. Toutefois, du point de vue de la planification, les protocoles optimaux pour le critère présenté à la section suivante, comme pour les  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{Q}$  du chapitre 3, vont dépendre en fait uniquement du rapport entre ce facteur et la variance du bruit d'observation. Cette variance est déterminée par les vélocimètres laser utilisés, et donc croissante avec la vitesse observée, elle-même environ proportionnelle au débit. En fin de compte, la variation du rapport sera faible d'un débit à l'autre. Nous verrons par ailleurs que les protocoles optimaux sont peu sensibles à la valeur de ce paramètre. Par conséquent, la suite de l'étude se fera pour  $Q = 1.6 \text{ m}^3/\text{s}$  sans perte de généralité.

On dispose des fonctions de régression et de la fonction moment de l'erreur structurale, il reste maintenant à définir le critère de performance et en inférer le critère d'optimalité.

## 5.5 Estimation et critères

On est ici dans le cas d'une fonctionnelle linéaire à estimer, évoqué parmi les extensions possibles aux critères ETIEQP et QIEQP décrites en section 3.3.4, puisqu'on souhaite estimer le débit

$$Q = L(v) = \int_{\mathcal{D}_R} v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x},$$

$\mathcal{D}_R$  étant le disque de rayon  $R$ . Pour une estimation des paramètres de régression  $\boldsymbol{\theta}$  par moindres carrés, l'erreur quadratique moyenne de l'estimateur  $\hat{Q}$  est donnée par la formule (3.16), avec

$$\mathbb{E}_r \{L(r)\mathbf{r}_n^\top\} = \int_{\mathcal{D}_R} \mathbf{c}_n(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \triangleq \mathbf{I}_{\mathbf{c}_n}.$$

Ici, une estimation de  $\boldsymbol{\theta}$  par moindres carrés pondérés paraît pertinente

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{MCP} = (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \mathbf{y}_n \triangleq \boldsymbol{\Gamma}_n \mathbf{y}_n,$$

puisque'on a estimé le moment d'ordre deux de l'erreur structurale et qu'on en déduit la matrice  $\mathbf{K}_n = \mathbf{C}_n + \sigma_e^2 \mathbf{I}_n$  des moments d'ordre deux des erreurs totales  $\mathbf{r}_n + \mathbf{e}_n$ . L'erreur quadratique moyenne de  $\hat{Q}$  devient alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{r,e} \left\{ \left( \hat{Q} - Q \right)^2 \right\} &= \zeta^2 + \mathbf{I}_\phi^\top \boldsymbol{\Gamma}_n \mathbf{K}_n \boldsymbol{\Gamma}_n^\top \mathbf{I}_\phi - 2 \mathbf{I}_{\mathbf{c}_n}^\top \boldsymbol{\Gamma}_n^\top \mathbf{I}_\phi \\ &= \zeta^2 + \text{tr} \left[ \mathbf{I}_\phi \mathbf{I}_\phi^\top (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right] - 2 \text{tr} \left[ \mathbf{I}_\phi \mathbf{I}_{\mathbf{c}_n}^\top \mathbf{K}_n^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n (\boldsymbol{\Phi}_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \boldsymbol{\Phi}_n)^{-1} \right], \end{aligned}$$

$$\text{avec } \zeta^2 = \mathbb{E}_r \left\{ \left( \int_{\mathcal{D}_R} r \right)^2 \right\}.$$

Avec l'hypothèse de gaussianité du processus stochastique représentant  $r$ , l'erreur  $\hat{Q} - Q$  d'estimation du débit est une variable gaussienne non centrée, d'espérance

$$m = \mathbf{I}_\phi^\top \mathbf{\Gamma}_n \mathbb{E}_r \{ \mathbf{r}_n \} - \mathbb{E}_r \left\{ \int_{\mathcal{D}_R} r \right\}$$

et dont on peut obtenir la fonction de répartition par

$$\mathbb{F}_{(\hat{Q}-Q)^2}(w) = \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{w} - m}{\sigma\sqrt{2}} \right) + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{w} + m}{\sigma\sqrt{2}} \right), \quad (5.5)$$

où  $\sigma^2$  est la variance de  $\hat{Q} - Q$ . On pourrait donc envisager également un critère d'optimisation fondé sur le quantile de l'erreur quadratique  $(\hat{Q} - Q)^2$ . L'hypothèse de gaussianité de  $r$  semble toutefois hasardeuse, comme l'illustre la figure 5.2 qui montre l'histogramme de l'erreur structurelle ponctuelle au point  $O$  centre du domaine ( $\rho_O = 0$ ) et le compare à la DDP gaussienne de mêmes moyenne et variance. Une estimation du quantile resterait possible par Monte Carlo, mais compte tenu des temps de calcul correspondants, nous ne considérons pas ici le quantile de l'EQM en tant que critère d'optimalité. Une comparaison des estimations du quantile obtenues par Monte Carlo et par la fonction de répartition (5.5) ci-dessus est donnée sur quelques exemples à la section suivante.

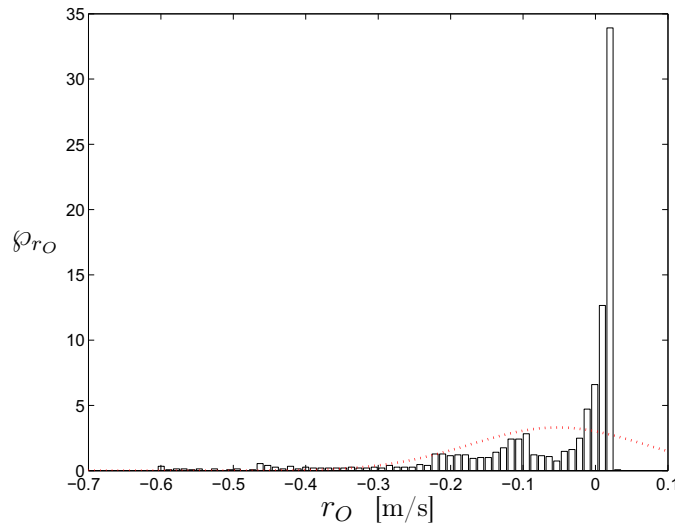


FIG. 5.2 – Histogramme de l'erreur structurelle ponctuelle  $r_O$  au centre  $O$  du domaine ( $\rho_O = 0$ ) et DDP gaussienne de mêmes moyenne et variance (pointillés).

Il nous reste à définir la variance du bruit d'observation. Comme annoncé à la remarque précédente, celle-ci est déterminée par les vélocimètres laser. On peut supposer pour ces instruments que l'incertitude relative de mesure est inférieure au pourcent. On considère alors un bruit d'observation avec un écart-type inférieur au pourcent de la valeur moyenne de la vitesse du fluide. Pour un débit de  $1.6 \text{ m}^3/\text{s}$ , cette vitesse moyenne est d'environ  $2 \text{ m/s}$ , ce qui donne pour un écart-type de 1%, un bruit de variance  $4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ . Nous considérons alors trois variances de bruit :  $4 \cdot 10^{-4}$ ,  $10^{-4}$  et  $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ , correspondant à des incertitudes relatives respectives de 1%, 0.5% et 0.1%.

## 5.6 Résultats

Les protocoles optimaux obtenus pour  $n = 6$  pour les différents vecteurs de fonctions de régression sont présentés sur la figure 5.3. On voit que pour les trois jeux de fonctions  $\phi_{LL}$ ,  $\phi_{LLR}$  et  $\phi_{PB}$  et pour les trois variances de bruit, les protocoles optimaux sont très peu différents l'un de l'autre. La différence avec le cas  $\phi_{PBR}$  pour les deux plus faibles variances est légèrement plus marquée.

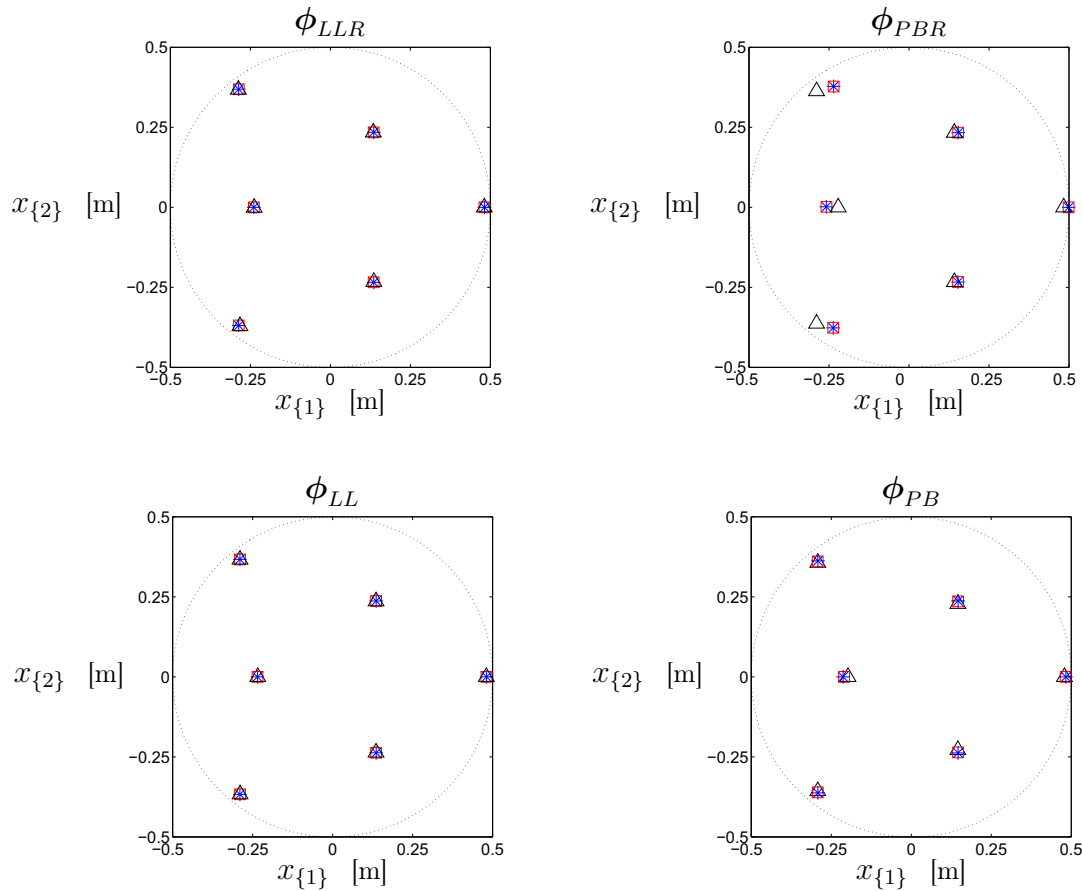


FIG. 5.3 – Protocoles optimaux pour les quatre jeux de fonctions de régression et  $n = 6$  : (\*)  $\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6}$ , (□)  $\sigma_e^2 = 10^{-2}$ , (○)  $\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ .

Le tableau 5.1 résume les valeurs de l'erreur quadratique moyenne à l'optimum pour les douze cas de figure considérés. Il indique également la norme de l'erreur relative correspondante

$$\text{NER} = \mathbb{E}_{r,e} \left\{ (\hat{Q} - Q)^2 / Q^2 \right\}^{1/2}$$

Le classement des quatre jeux de fonctions reste le même quelle que soit la variance du bruit. On note que les jeux complets à six fonctions obtiennent de meilleurs résultats que le jeu restreint à quatre fonctions correspondant. Par ailleurs, l'utilisation de la fonction lin-log est bénéfique par rapport à celle du profil en conduite rectiligne, au point que le jeu  $\phi_{LLR}$  à quatre fonctions est plus performant que le jeu complet  $\phi_{PB}$ .

$\phi$	$\phi_{LL}$	$\phi_{LLR}$	$\phi_{PB}$	$\phi_{PBR}$
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.158 \cdot 10^{-4}$	$2.201 \cdot 10^{-4}$	$2.242 \cdot 10^{-4}$	$2.285 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : NER	0.918%	0.927%	0.936%	0.945%
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : class.	1	2	3	4
$\sigma_e^2 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.268 \cdot 10^{-4}$	$2.310 \cdot 10^{-4}$	$2.349 \cdot 10^{-4}$	$2.394 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : NER	0.941%	0.950%	0.958%	0.967%
$\sigma_e^2 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : class.	1	2	3	4
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.608 \cdot 10^{-4}$	$2.651 \cdot 10^{-4}$	$2.684 \cdot 10^{-4}$	$2.728 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : NER	1.009%	1.017%	1.024%	1.032%
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : class.	1	2	3	4

TAB. 5.1 – Classement des jeux de fonctions selon la meilleure performance obtainable en termes d'erreur quadratique moyenne sur le débit estimé. †(en  $\text{m}^6/\text{s}^2$ )

On retient donc le jeu de fonctions  $\phi_{LL}$ .

À titre indicatif, on calcule les valeurs du quantile d'ordre 95% de l'erreur relative absolue  $|\hat{Q} - Q|/Q$  pour ce jeu de fonctions, par les deux méthodes mentionnées à la section précédente : en utilisant la fonction de répartition (5.5), on obtient 1.800%, 1.845% et 1.978% respectivement pour  $\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6}$ ,  $10^{-4}$  et  $4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$  ; par Monte Carlo, les valeurs respectives correspondantes sont 1.868%, 1.892% et 1.980%. On peut en déduire que l'hypothèse de gaussianité de  $r$  a tendance à réduire la queue de la loi de l'erreur, menant à des sous-estimations du quantile. La figure 5.4, comparant la fonction de répartition estimée par (5.5) à celle obtenue par Monte Carlo, met en évidence ce phénomène.

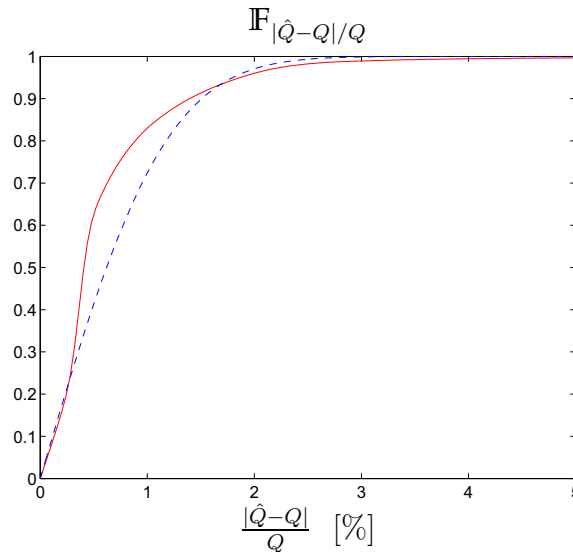


FIG. 5.4 – Comparaison des fonctions de répartition de l'erreur relative absolue sur le débit (en %) estimées par Monte Carlo (continu) et par la formule (5.5) (tirets) pour une variance de bruit  $\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ .

À titre illustratif, la figure 5.5 présente un exemple de profil pour la singularité de type double coude non coplanaire, ainsi que sa meilleure estimation pour le jeu de fonctions retenu (protocole complet) et l'estimation moyenne obtenue avec le protocole optimal à  $n = 6$  points pour  $\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ . L'erreur relative absolue moyenne sur le débit est de 0.11%.

Cette erreur est à mettre en regard de l'amplitude de l'erreur d'estimation du profil, visible sur la figure 5.5(d), qui est de l'ordre de 10% de la vitesse. En fait, l'estimation du débit est beaucoup plus précise que celle du profil : les erreurs locales d'estimation de la vitesse se compensent par intégration pour globalement donner une estimation plus précise du débit. Cette remarque met en évidence l'intérêt d'utiliser un critère directement lié à l'objectif — l'estimation du débit — qui permet de prendre en compte ce phénomène.

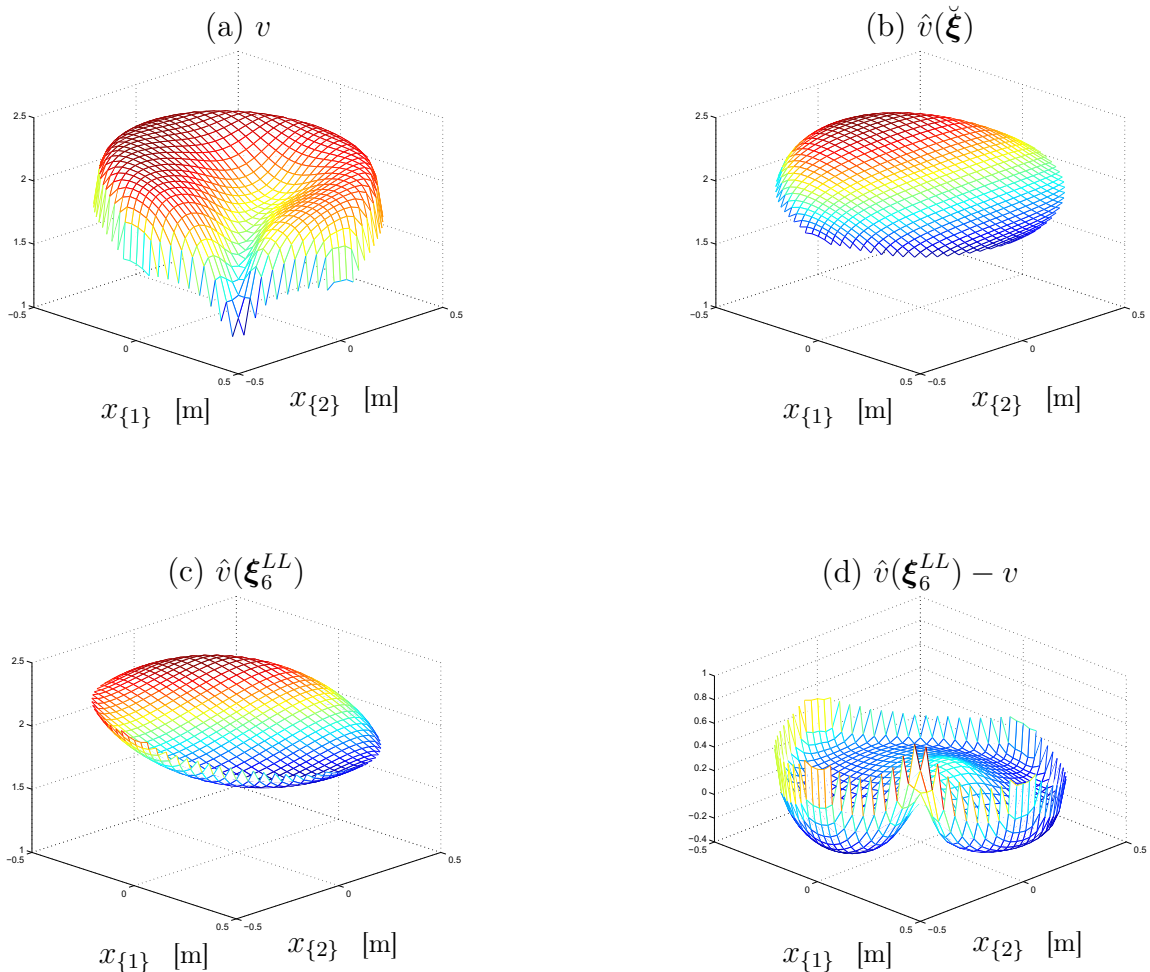


FIG. 5.5 – Exemple de profil et estimations (en m/s) avec le jeu de fonctions  $\phi_{LL}$ . (a) Profil de vitesse (issu du code aux éléments finis). (b) Meilleure estimation au sens des MCP (pour le protocole complet  $\check{\xi}$ ). (c) Estimation  $\hat{v}$  pour le protocole  $\xi_6^{LL}$  de taille 6 retenu par notre méthode. (d) Erreur d'estimation  $\hat{v}(\xi_6^{LL}) - v$  pour ce protocole.

Comparons maintenant les performances obtenues par notre démarche à celles des protocoles optimaux au sens de critères issus de la littérature :

- le protocole  $D$ -optimal, minimisant  $\det (\Phi_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \Phi_n)^{-1}$ ,
- le protocole  $L$ -optimal, minimisant  $\text{tr} \left[ \mathbf{I}_\phi \mathbf{I}_\phi^\top (\Phi_n^\top \mathbf{K}_n^{-1} \Phi_n)^{-1} \right]$ ,
- le protocole robuste  $\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimal (cf. section 3.6.2) — ici un hexagone régulier de rayon  $R/(2 \cos(\pi/6))$ .

Le tableau 5.2 présente les performances et les efficacités des protocoles  $D$ -,  $I$ - et  $\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimaux.

Il faut noter ici que les performances des protocoles  $\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimaux sont calculées pour un jeu de fonctions différent, correspondant aux modèles polynomiaux du premier ordre en  $x_{\{1\}}, x_{\{2\}}$ , étant donné que ces protocoles sont dégénérés pour le jeu  $\phi_{LL}$ .

Le protocoles  $D$ -optimaux sont quant à eux définis à un facteur près : ils sont constitués de deux triangles équilatéraux centrés, de rayon  $\rho_1 = R$  et  $\rho_2 \approx 0.343 m$ , leur orientation relative (le décalage angulaire) étant indifférente vis-à-vis du critère de  $D$ -optimalité. Du point de vue de notre critère, cette orientation n'est cependant pas indifférente. Les résultats présentés dans le tableau 5.2 sont les valeurs minimales, obtenues pour un décalage angulaire de  $\pi/3$ .

protocole	$L$ -optimal	$D$ -optimal	$\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimal
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.210 \cdot 10^{-4}$	$7.657 \cdot 10^{-4}$	$62.53 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : eff.	97.7%	28.2%	3.45%
$\sigma_e^2 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.319 \cdot 10^{-4}$	$7.811 \cdot 10^{-4}$	$62.63 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : eff.	97.8%	29.0%	3.62%
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : EQM <sup>†</sup>	$2.639 \cdot 10^{-4}$	$8.303 \cdot 10^{-4}$	$62.93 \cdot 10^{-4}$
$\sigma_e^2 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$ : eff.	98.8%	31.4%	4.14%

TAB. 5.2 – Performances et efficacités en termes d'erreur quadratique moyenne sur le débit estimé des protocoles  $L$ -,  $D$ - et  $\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimaux. <sup>†</sup>(en  $\text{m}^6/\text{s}^2$ )

On remarque les piètres performances du protocole  $\mathcal{D}_{M(e)}$ -optimal, qui mettent en évidence la difficulté de ce type de protocoles, choisis pour obtenir une robustesse maximale, à obtenir une estimation précise dans le cas où l'a priori est précis.

Les protocoles  $D$ -optimaux présentent des performances relativement correctes, mais il convient de remarquer qu'ils ne pourraient être utilisés en pratique, parce que la vitesse n'est matériellement pas observable sur la paroi de la conduite ( $\rho = R$ ).

Les protocoles  $L$ -optimaux obtiennent eux de bonnes performances, sans pour autant avoir une perte négligeable par rapport à nos protocoles, mais l'étude qui va suivre montre qu'ils sont plus sensibles à une mauvaise spécification de l'a priori.

Cette étude, qu'on peut assimiler à une analyse de sensibilité, est motivée par le fait que les données a priori sont par essence lacunaires : les cinq types de singularités de conduite disponibles ne représentent pas exhaustivement l'ensemble des singularités qu'on rencontre dans la réalité. Il existe non seulement des coudes simples dont l'angle

est quelconque et des configurations de doubles coudes diverses et variées, mais également des singularités qui ne rentrent pas dans ces catégories, tel que les rétrécissements ou élargissements de conduite par exemple.

On envisage pour analyser la sensibilité des protocoles à la spécification de l'a priori une démarche de type validation croisée, où :

- les protocoles sont optimisés pour une erreur structurelle correspondant à un ensemble  $\mathfrak{E}_1$  de profils ( $\mathfrak{E}_1$ -optimal),
- les estimées au sens des MCP sont établies à partir de ce même ensemble,
- la performance est calculée pour une erreur structurelle correspondant à l'ensemble  $\mathfrak{E}_2$  complémentaire de  $\mathfrak{E}_1$  dans l'ensemble total des profils disponibles.

Les ensembles  $\mathfrak{E}_1$  considérés ici sont choisis de sorte à représenter quatre types de singularités parmi les cinq à disposition. Chacun des ensembles  $\mathfrak{E}_2$  est par conséquent constitué des profils correspondant à un seul type de singularité. Le tableau 5.3 présente les résultats obtenus pour une variance de bruit de  $4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}^2$  ; les cinq cas de figure sont dénommés par le type de singularité de  $\mathfrak{E}_2$ .

singularité	30°	60°	90°	coplanaire	non-coplan.
$\mathfrak{E}_2$ -opt. : EQM <sup>†</sup>	$1.040 \cdot 10^{-4}$	$3.242 \cdot 10^{-4}$	$4.759 \cdot 10^{-4}$	$0.687 \cdot 10^{-4}$	$2.675 \cdot 10^{-4}$
$\mathfrak{E}_1$ -opt. : EQM <sup>†</sup>	$1.105 \cdot 10^{-4}$	$3.357 \cdot 10^{-4}$	$4.859 \cdot 10^{-4}$	$0.840 \cdot 10^{-4}$	$2.905 \cdot 10^{-4}$
$\mathfrak{E}_1$ -opt. : eff.	94.1%	96.6%	97.9%	81.7%	92.8%
$L$ -opt. : EQM <sup>†</sup>	$1.214 \cdot 10^{-4}$	$3.782 \cdot 10^{-4}$	$5.339 \cdot 10^{-4}$	$0.844 \cdot 10^{-4}$	$3.199 \cdot 10^{-4}$
$L$ -opt. : eff.	85.7%	85.7%	89.1%	81.3%	83.6%

TAB. 5.3 – Performances et efficacités en termes d'erreur quadratique moyenne sur le débit estimé, pour une erreur structurelle correspondant à l'ensemble  $\mathfrak{E}_2$  de profils, des protocoles  $\mathfrak{E}_2$ -,  $\mathfrak{E}_1$ - et  $L$ -optimaux. <sup>†</sup>(en  $\text{m}^6/\text{s}^2$ )

Il ressort de cette étude que les protocoles optimaux au sens de notre critère sont moins sensibles à une mauvaise spécification de l'a priori que les protocoles  $L$ -optimaux. Ils seront par conséquent vraisemblablement plus performants que ces derniers pour des configurations de conduite non incluses dans les données a priori.

## 5.7 Conclusion

L'application présentée a permis d'illustrer d'autres aspects de la démarche que ceux mis en œuvre au chapitre 3, montrant la généralité et l'adaptabilité de notre approche.

Premièrement, l'objectif d'estimation du débit, qui n'est pas directement la fonction cible mais une fonctionnelle linéaire de celle-ci, nous a naturellement mené à un critère de performance différent.

Un deuxième aspect abordé est l'introduction de connaissances a priori précises, disponibles ici sous une forme permettant d'extraire un échantillon supposé représentatif de

la population d'erreurs structurelles potentielles. Cette introduction se fait de manière directe et permet d'intégrer la totalité de l'information disponible. Dans ces conditions, nous avons fait le choix d'une estimation des paramètres de régression par moindres carrés pondérés, qui entre également dans le cadre de notre démarche, de même que la non centralité de l'erreur structurelle, qui est prise en compte directement au travers de l'utilisation de la fonction moment d'ordre deux en remplacement de la fonction de covariance.

Le caractère incomplet des connaissances a priori vis-à-vis des ambitions fixées nous a par ailleurs incités à vérifier la robustesse des protocoles optimaux envers une mauvaise spécification de l'a priori, par une méthode de validation croisée. Les résultats de cette étude montrent l'apport de notre approche concernant ce point.

---

## Bilan et perspectives

L'idée générale qui a guidé les travaux que nous avons présentés est celle de la recherche de la robustesse la plus globale possible, mais avec l'idée de garder la maîtrise du degré de robustesse. En effet, viser le degré maximum de robustesse peut ne pas sembler toujours pertinent : il faut garder à l'esprit l'objectif premier qui est d'obtenir une estimation précise de la cible, objectif visiblement contradictoire avec la robustesse.

C'est cette volonté de robustesse maîtrisée qui nous a incités à choisir une modélisation de l'erreur structurelle par processus stochastique. Ce type de modélisation est en effet très flexible :

- Il permet d'une part une grande robustesse en offrant la possibilité de se prémunir contre de vastes ensembles d'erreurs structurelles potentielles. Par exemple, la fonction de covariance gaussienne utilisée au chapitre 3, définissant un espace de dimension infinie d'erreurs structurelles, met l'accent sur la robustesse.
- D'autre part, son aptitude à intégrer des connaissances a priori est élevée. Si l'on dispose d'une connaissance a priori précise, comme dans l'application du chapitre 5, on peut l'utiliser pour construire la fonction moment d'ordre deux et privilégier ainsi la précision de l'estimation.

Dans la démarche que nous avons suivie, la spécification de la fonction de covariance (ou plus généralement de la fonction moment d'ordre deux) du processus stochastique constitue donc un premier moyen de favoriser plus ou moins la robustesse par rapport à la précision.

L'introduction de connaissances a priori dans la situation du premier point ci-dessus peut se faire au travers de la spécification des paramètres de la fonction de covariance. Cette manière indirecte d'opérer peut rendre la tâche insatisfaisante si l'information disponible a priori est difficilement réductible aux valeurs de quelques paramètres. Par ailleurs, si cette information est quasiment inexistante, choisir les valeurs de ces hyperparamètres peut s'avérer délicat. Cette difficulté sollicite un niveau supplémentaire de robustesse, vis-à-vis des hyperparamètres, que nous avons mis en œuvre par la définition du critère maximin sur l'efficacité.

La situation considérée — l'insuffisance d'information a priori — justifie le choix de ce type de critère. En se plaçant d'un autre point de vue, l'idée d'employer un critère différent pour ce second niveau de robustesse pourrait être poursuivie : en s'inspirant des travaux réalisés concernant les structures non-LP ([45], [46]), on peut par exemple

---

envisager une approche bayésienne fondée sur la spécification d'une loi a priori pour les hyperparamètres.

Une autre voie d'exploration possible porterait sur la définition d'un critère de type maximin établi non plus sur l'efficacité, mais directement sur la performance du protocole. On peut effectivement se demander si, dans l'absolu, obtenir une bonne efficacité est plus important qu'obtenir une bonne performance.

Dans la seconde situation, nous avons pu constater au travers de l'application du chapitre 5 que même si la connaissance a priori est significative et détaillée, elle peut rester incomplète. Un deuxième niveau de robustesse apparaît alors ici aussi. Dans un cadre tel que celui de l'application, il pourrait être traité par l'intégration de la validation croisée directement dans le critère d'optimalité.

D'une manière générale, la question du dosage de l'information a priori et de la robustesse mérite un approfondissement.

Le formalisme probabiliste en lui-même autorise une maîtrise de la robustesse au travers des possibilités offertes en termes de choix du critère d'optimalité. Le critère du quantile en est la parfaite expression : le positionnement robuste incite à considérer les cas extrêmes les plus défavorables, mais le risque que cela se fasse au détriment de la qualité de l'estimation pour la majorité des autres cas invite à la prudence. L'ordre du quantile permet alors de quantifier le degré de robustesse désiré : plus celui-ci est proche de l'unité, plus l'influence des cas extrêmes est grande et plus le degré de robustesse est élevé.

L'impact exact de ce paramètre sur les protocoles optimaux pourrait faire l'objet de travaux futurs. Cette perspective paraît d'autant plus pertinente qu'on aborde un paradoxe possible de l'approche robuste : les cas extrêmes sont vraisemblablement fortement dépendants de la spécification de l'a priori sur l'erreur structurelle, ce qui fait qu'augmenter l'ordre du quantile impliquerait une plus grande sensibilité vis-à-vis de cet a priori. On rejoint ici le point évoqué au paragraphe précédent.

D'autres perspectives concernent la traduction de notre démarche dans le cas de contraintes différentes. Cette idée a d'ailleurs inspiré d'autres travaux dans le département.

Une extension au cas séquentiel est développée dans le cadre de la thèse de Hassan El Abiad [47]. Le même type de modélisation probabiliste de l'erreur structurelle est utilisé, la principale différence résidant dans le fait que les données déjà observées constituent une information a priori supplémentaire, ainsi toutes les DDP sont calculées conditionnellement à ces données. On retrouve ici une manière d'introduire de l'information a priori.

D'autres travaux engagés par Laurent Le Brusquet s'intéressent à l'identification des coefficients d'une équation différentielle ordinaire quand elle contient un terme incertain ou mal spécifié, ce qui constitue une extension aux modèles dynamiques. Dans ce cadre, une modification de la méthode numérique du calcul du quantile a permis de l'étendre au cas de variables gaussiennes non centrées.

Dans le même ordre d'idée, il est envisageable de considérer d'autres types de structures et de méthodes d'estimation. Nous avons déjà évoqué au chapitre 3 les méthodes

---

semi-paramétriques telles que le krigeage. On pense également aux structures non-LP. Là encore, l'approche probabiliste proposée est applicable et des travaux en cours tendent à montrer qu'elle permet de contrôler la robustesse.



## Annexe

On cherche à montrer le résultat énoncé à la section 3.4.3 : dans le cas d'une régression polynomiale de degré  $d = 0$ , le protocole  $\mathcal{T}$ -optimal pour  $n = 1$  est  $\boldsymbol{\xi}_1 = \{\mathbf{0}_{s \times 1}\}$  (le centre du domaine), quelle que soit la valeur de  $\lambda$ .

**Preuve** Quand  $d = 0$ , l'ETIEQP s'écrit :

$$\text{ETIEQP} = 2^s \zeta^2 + \frac{2^s}{n} \sigma_e^2 + \frac{2^s}{n^2} \sum_{i,j=1}^n c_2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \int_{\mathcal{X}} c_2(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) d\mathbf{w}.$$

Pour  $n = 1$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \text{ETIEQP} &= 2^s \zeta^2 + 2^s \sigma_e^2 + 2^s \zeta^2 - 2 \int_{\mathcal{X}} c_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\ &= K - 2 \prod_{i=1}^s \int_{-1}^1 e^{-\left(\frac{w_{\{i\}} - x_{1\{i\}}}{\lambda}\right)^2} dw_{\{i\}}, \end{aligned}$$

où  $K = 2^s \zeta^2 + 2^s \sigma_e^2 + 2^s \zeta^2$  est un terme constant vis-à-vis du protocole. Minimiser l'ETIEQP — ou le critère  $\mathcal{T}$  — revient donc à maximiser le produit des intégrales. Ces intégrales étant positives, il faut maximiser indépendamment chacune d'entre elles, ce qui nous ramène au cas unidimensionnel.

On cherche donc :

$$x_1^* = \arg \max_{x_1 \in [-1; 1]} \int_{-1}^1 e^{-\left(\frac{w-x_1}{\lambda}\right)^2} dw.$$

En utilisant le changement de variable  $u = w - x_1$ , l'intégrale à maximiser devient

$$\int_{-1-x_1}^{1-x_1} e^{-\left(\frac{u}{\lambda}\right)^2} du \triangleq f(-1-x_1, 1-x_1), \quad (5.6)$$

$f$  étant définie ici par souci de concision. On a alors :

$$\begin{aligned} f(-1-x_1, 1-x_1) &= f(-1-x_1, -1) + f(-1, 1) + f(1, 1-x_1) \\ &= f(1, 1+x_1) + f(-1, 1) + f(1, 1-x_1), \end{aligned}$$

par parité de la fonction gaussienne.

Il reste maintenant à vérifier que  $f(1, 1+x_1) + f(1, 1-x_1)$  est toujours négatif ou nul, la nullité étant atteinte pour  $x_1 = 0$ , afin de prouver que  $x_1^* = 0$ .

Pour cela, on utilise le changement de variable  $v = 2 - u$ , qui donne

$$f(1, 1 - x_1) = - \int_1^{1+x_1} e^{-\left(\frac{2-v}{\lambda}\right)^2} dv. \quad (5.7)$$

On a par ailleurs l'équivalence

$$\left(v \geq 1\right) \iff \left(e^{-\left(\frac{v}{\lambda}\right)^2} \leq e^{-\left(\frac{2-v}{\lambda}\right)^2}\right). \quad (5.8)$$

Donc, pour  $x_1 \geq 0$ , on a

$$\int_1^{1+x_1} e^{-\left(\frac{v}{\lambda}\right)^2} dv \leq \int_1^{1+x_1} e^{-\left(\frac{2-v}{\lambda}\right)^2} dv,$$

soit, en réutilisant la définition (5.6) à gauche et l'égalité (5.7) à droite,

$$f(1, 1 + x_1) \leq -f(1, 1 - x_1).$$

D'où le résultat.

Pour  $x_1 \leq 0$ , on utilise la contraposée de (5.8) pour aboutir finalement au même résultat :

$$\begin{aligned} \int_{1+x_1}^1 e^{-\left(\frac{v}{\lambda}\right)^2} dv &\geq \int_{1+x_1}^1 e^{-\left(\frac{2-v}{\lambda}\right)^2} dv \\ -f(1, 1 + x_1) &\geq f(1, 1 - x_1). \end{aligned}$$

■

---

## Bibliographie

- [1] Ronald A. Fisher, *Statistical Methods, Experimental Design and Scientific Inference*, Oxford University Press, 1990.
  - [2] Anthony C. Atkinson et R. A. Bailey, “One hundred years of the design of experiments on and off the pages of *Biometrika*,” *Biometrika*, vol. 88, no. 1, pp. 53–97, 2001.
  - [3] G. E. P. Box et N. R. Draper, “A basis for the selection of a response surface design,” *Journal of the American Statistical Association*, vol. 54, pp. 622–654, 1959.
  - [4] Werner G. Müller et Andrej Pázman, “Measures for designs in experiments with correlated errors,” *Biometrika*, vol. 90, no. 2, pp. 423–434, 2003.
  - [5] Éric Walter et Luc Pronzato, *Identification de modèles paramétriques à partir de données expérimentales*, Masson, Paris, 1994.
  - [6] Friedrich Pukelsheim, *Optimal Design of Experiments*, John Wiley, New York, 1993.
  - [7] Jack Carl Kiefer et Jacob Wolfowitz, “Optimum designs in regression problems,” *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 30, pp. 271–294, 1959.
  - [8] Marcel Berger, *Géométrie*, CEDIC/Nathan, Paris, 1979.
  - [9] Fred J. Hickernell et Min-Qian Liu, “Uniform designs limit aliasing,” *Biometrika*, vol. 89, no. 4, pp. 893–904, 2002.
  - [10] Mark E. Johnson, Leslie M. Moore, et Donald Ylvisaker, “Minimax and maximin distance designs,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 26, pp. 131–148, 1990.
  - [11] Rong-Xian Yue et Fred J. Hickernell, “Robust designs for fitting linear models with misspecification,” *Statistica Sinica*, vol. 9, pp. 1053–1069, 1999.
  - [12] Zhide Fang et Douglas P. Wiens, “Robust regression designs for approximate polynomial models,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 117, pp. 305–321, 2003.
  - [13] Zhide Fang, “Robust extrapolation designs for biased polynomial models,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 87, pp. 135–147, 2000.
  - [14] Grace Montepiedra et Valery V. Fedorov, “Minimum bias designs with constraints,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 63, pp. 97–111, 1997.
  - [15] Dennis Cook et Christopher J. Nachtsheim, “Model-robust, linear-optimal designs,” *Technometrics*, vol. 24, pp. 49–54, 1982.
-

- 
- [16] Christopher K. I. Williams, "Prediction with Gaussian processes : From linear regression to linear prediction and beyond," in *Learning in Graphical Models*, M. I. Jordan, Ed., pp. 599–621. Disponible en ligne : <http://www.gaussianprocess.org/>, 1998.
- [17] Georges Matheron, "Principles of geostatistics," *Economic Geology*, vol. 58, pp. 1246–1266, 1963.
- [18] Chang Yue Huang, *Planification d'expériences pour la discrimination entre structures de modèles*, thèse de doctorat, Université de Paris-Sud 11, 1991.
- [19] E. Läuter, "Experimental planning in a class of models," *Mathematische Operationsforschung und Statistik*, vol. 5, pp. 673–708, 1974.
- [20] Holger Dette et Tobias Franke, "Robust designs for polynomial regression by maximizing a minimum of  $D$ - and  $D_1$ -efficiencies," *The Annals of Statistics*, vol. 29, no. 4, pp. 1024–1049, 2001.
- [21] Jack Carl Kiefer et Jacob Wolfowitz, "The equivalence of two extremum problems," *Canadian Journal of Mathematics*, vol. 12, pp. 363–366, 1960.
- [22] Shawn X. Liu et Douglas P. Wiens, "Robust designs for approximately polynomial regression," *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 64, pp. 369–381, 1997.
- [23] Theodore T. Allen, Liyang Yu, et John Schmitz, "An experimental design criterion for minimizing meta-model prediction errors applied to die casting process design," *Applied Statistics*, vol. 52, no. 1, pp. 103–117, 2003.
- [24] Valery V. Fedorov, *Theory of Optimal Experiments*, Academic Press, New York, 1972.
- [25] Henry P. Wynn, "Results in the construction of  $D$ -optimum experimental designs," *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 34, pp. 133–147, 1972.
- [26] William DuMouchel et Bradley Jones, "A simple Bayesian modification of  $D$ -optimal designs to reduce dependence on an assumed model," *Technometrics*, vol. 36, pp. 37–47, 1994.
- [27] M. D. McKay, W. J. Conover, et R. J. Beckman, "A comparison of three methods for selection values of input variables in the analysis of output from a computer code," *Technometrics*, vol. 21, pp. 239–245, 1979.
- [28] Grace Wahba, *Spline Models for Observational Data*, SIAM, Philadelphia, 1990.
- [29] George Kimeldorf et Grace Wahba, "A correspondance between Bayesian estimation on stochastic processes and smoothing by splines," *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 41, no. 2, pp. 495–502, 1970.
- [30] Jerome Sacks, William J. Welch, Toby J. Mitchell, et Henry P. Wynn, "Design and analysis of computer experiments," *Statistical Science*, vol. 4, no. 4, pp. 409–435, 1989.
- [31] Astrid Jourdan et Dominique Collombier, "Régression trigonométrique et plans d'échantillonnage pour expériences simulées," *Revue de Statistique Appliquée*, vol. 49, n° 2, p. 5–26, 2001.
-

- 
- [32] Holger Dette, “Optimal designs for identifying the degree of a polynomial regression,” *The Annals of Statistics*, vol. 23, no. 4, pp. 1248–1266, 1995.
- [33] Andrej Pázman et Luc Pronzato, “Quantile and probability-level criteria for nonlinear experimental design,” in *mODa 8 — Advances in Model-Oriented Design and Analysis : Proceedings of the 8th International Workshop on Model-Oriented Design and Analysis*, 2007, pp. 157–164.
- [34] Luc Pronzato et Éric Walter, “Robust experiment design via maximin optimization,” *Mathematical Biosciences*, vol. 89, pp. 161–176, 1988.
- [35] Christine H. Müller, “Maximin efficient designs for estimating nonlinear aspects in linear models,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 44, no. 1, pp. 117–132, 1995.
- [36] Rainer Schwabe, “Maximin efficient designs — another view at  $D$ -optimality,” *Statistics and Probability Letters*, vol. 35, no. 2, pp. 109–114, 1997.
- [37] Stefanie Biedermann, Holger Dette, et Andrey Pepelyshev, “Maximin optimal designs for a compartmental model,” in *mODa 7 — Advances in Model-Oriented Design and Analysis : Proceedings of the 7th International Workshop on Model-Oriented Design and Analysis*, New York, USA, 2004, pp. 41–49, Physica-Verlag.
- [38] Holger Dette, Ignacio Martinez Lopez, Isabel M. Ortiz Rodriguez, et Andrey Pepelyshev, “Maximin efficient design of experiments for exponential regression models,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 136, no. 12, pp. 4397–4418, 2006.
- [39] L. Angelis, E. Bora-Senta, et C. Moyssiadis, “Optimal exact experimental designs with correlated errors through a simulated annealing algorithm,” *Computational Statistics and Data Analysis*, vol. 37, no. 3, pp. 275–296, 2002.
- [40] Stephen B. Duffull, Sylvie Retout, et France Mentré, “The use of simulated annealing for finding optimal population designs,” *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, vol. 69, no. 1, pp. 25–35, 2002.
- [41] Alwell J. Oyet et Douglas P. Wiens, “On exact minimax wavelet designs obtained by simulated annealing,” *Statistics and Probability Letters*, vol. 61, no. 1, pp. 111–121, 2003.
- [42] Ioan Cristian Trelea, “The particle swarm optimization algorithm : convergence analysis and parameter selection,” *Information Processing Letters*, vol. 85, no. 6, pp. 317–325, 2003.
- [43] Shu-Kai S. Fan et Erwie Zahara, “A hybrid simplex search and particle swarm optimization for unconstrained optimization,” *European Journal of Operational Research*, vol. 181, no. 2, pp. 527–548, 2007.
- [44] Gilles Fleury, *Reconstruction de profils de vitesse à partir de données lacunaires et optimisation d’instrument – application à la débitmétrie ultrasonore*, thèse de doctorat, Université de Paris-Sud 11, 1994.
- [45] Luc Pronzato et Éric Walter, “Robust experiment design via stochastic approximation,” *Mathematical Biosciences*, vol. 75, pp. 103–120, 1985.
- [46] Éric Walter et Luc Pronzato, “Optimal experiment design for nonlinear models subject to large prior uncertainties,” *Modelling Methodology Forum of the American Journal of Physiology*, vol. 253, pp. 530–534, 1987.
-

- 
- [47] Hassan El Abiad, Laurent Le Brusquet, Morgan Roger, et Marie-Ève Davoust, “Model-robust sequential design of experiments for identification problems,” in *International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*, avril 2007, pp. 441–444.
- [48] Raymond H. Myers et Douglas C. Montgomery, *Response Surface Methodology*, John Wiley, New York, 1995.
- [49] Jerome Sacks et Donald Ylvisaker, “Some model robust designs in regression,” *The Annals of Statistics*, vol. 12, no. 4, pp. 1324–1348, 1984.
- [50] Jerome Sacks et Donald Ylvisaker, “Model robust design in regression: Bayes theory,” in *Proceedings of the Berkeley Conference in Honor of Jerzy Neyman and Jack Kiefer*, Lucien M. Le Cam and Richard A. Olsen, Eds., New York, USA, 1985, vol. II, pp. 667–679, Wadsworth.
- [51] Donald Ylvisaker, “Prediction and design,” *The Annals of Statistics*, vol. 15, no. 1, pp. 1–19, 1987.
- [52] Ingo Steinwart, Don Hush, et Clint Scovel, “An explicit description of the reproducing Hilbert spaces of Gaussian RBF kernels,” Tech. Rep. LA-UR-04-8274, Los Alamos National Laboratory, USA, 2004, submitted to *IEEE Transactions on Information Theory*.
- [53] Grace Wahba, “Improper priors, spline smoothing and the problem of guarding against model errors in regression,” *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 40, no. 3, pp. 364–372, 1978.
- [54] Vladimir N. Vapnik, “An overview of statistical learning theory,” *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 10, no. 5, pp. 988–999, 1999.
- [55] François Pasqualini et Emmanuelle Josse, “Robust optimization of experimental designs in microelectronics processes using a stochastic approach,” in *ASMC 2002, IEEE/SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference*, 2002, pp. 187–192.
- [56] William W. Welch, Robert R. Buck, Jerome Sacks, Henry P. Wynn, Toby J. Mitchell, et Max D. Morris, “Screening, predicting and computer experiments,” *Technometrics*, vol. 34, no. 1, pp. 15–25, 1992.
- [57] Max D. Morris, Toby J. Mitchell, et Donald Ylvisaker, “Bayesian design and analysis of computer experiments: use of derivatives in surface prediction,” *Technometrics*, vol. 35, no. 3, pp. 243–255, 1993.
- [58] Carla Currin, Toby J. Mitchell, Max D. Morris, et Donald Ylvisaker, “Bayesian prediction of deterministic functions, with applications to the design and analysis of computer experiments,” *Technometrics*, vol. 35, no. 3, pp. 243–255, 1993.
- [59] Fred J. Hickernell et Xiaoquin Wang, “The error bounds and tractability of quasi-Monte Carlo algorithms in infinite dimension,” *Mathematics of Computation*, vol. 71, no. 240, pp. 1641–1661, 2001.
- [60] Douglas P. Wiens, “Minimax design for approximately linear regression,” *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 31, pp. 353–371, 1992.
- [61] Douglas P. Wiens, “Robustness in spatial studies II : minimax design,” *Environmetrics*, vol. 16, pp. 205–217, 2005.
-

- 
- [62] Walter Tinsson, “Critères d’efficacité pour plans d’expérience à facteurs quantitatifs et effets de blocs aléatoires,” *Revue de Statistique Appliquée*, vol. XLIX, n° 1, p. 55–78, 2001.
- [63] Walter Tinsson, “Prédiction de la réponse moyenne au moyen d’un plan d’expérience à facteurs quantitatifs et effets de blocs aléatoires,” *Revue de Statistique Appliquée*, vol. XLVII, n° 4, p. 47–67, 1999.
- [64] Walter Tinsson, *Plans d’expérience à facteurs quantitatifs et effets de blocs aléatoires*, thèse de doctorat, Université de Pau et des Pays de l’Adour, 1998.
- [65] Walter Tinsson, “Estimation des paramètres du modèle à effets de blocs fixes avec des plans d’expérience usuels,” 2001.
- [66] B. Scibilia, A. Kobi, R. Chassagnon, et A. Barreau, “Plans complémentaires et plans imbriqués,” *Revue de Statistique Appliquée*, vol. XLIX, n° 2, p. 27–44, 2001.
- [67] Luc Pronzato, *Synthèse d’expériences robustes pour modèles à paramètres incertains*, thèse de doctorat, Université de Paris-Sud 11, 1986.
- [68] Luc Pronzato, “Experimental design with random regressors at the design stage,” Disponible en ligne : <http://www.i3s.unice.fr/~pronzato/biblio.html>, mars 2000.
- [69] Luc Pronzato et E. Thierry, “A minimum-entropy estimator for regression problems with unknown distribution of observation errors,” in *Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering, 20th Int. Workshop*, 2001, pp. 169–180.
- [70] Luc Pronzato, “Acceleration of  $D$ -optimum design algorithms by removing non-optimal support point,” rapp. rech. I3S/RR-2002-05-FR, Laboratoire I3S, Université de Nice Sophia-Antipolis, mars 2002.
- [71] Luc Pronzato et E. Thierry, “Sequential experimental design and response optimisation,” *Statistical Methods and Applications*, vol. 11, pp. 277–292, 2003.
- [72] Andrej Pázman, *Foundations of Optimum Experimental Design*, VEDA, Bratislava ; D. Reidel, Dordrecht, 1986.
- [73] Paola Sebastiani et Henry P. Wynn, “Maximum entropy sampling and optimal Bayesian experimental design,” *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 92, no. 1, pp. 145–157, 2000.
- [74] Anthony C. Atkinson et A. N. Donev, *Optimum Experimental Designs*, Oxford University Press, 1992.
- [75] Douglas C. Montgomery, *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley, New York, 1976.
- [76] S. Robin, *Introduction aux plans d’expérience factoriels*, Supélec.
- [77] A. O’Hagan, “Curve fitting and optimal design for prediction,” *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 40, no. 1, pp. 1–42, 1978.
- [78] Dennis Cook et Valery Fedorov, “Constrained optimization of experimental design,” *Statistics*, vol. 26, pp. 129–178, 1995.
- [79] Kathryn Chaloner et Isabella Verdinelli, “Bayesian experimental design: a review,” *Statistical Science*, vol. 10, pp. 273–304, 1995.
-

- [80] Douglas P. Wiens et Julie Zhou, “Robust designs based on the infinitesimal approach,” *Journal of the American Statistical Association*, vol. 92, pp. 1503–1511, 1997.