Analyse de sensibilité pour les modèles numériques associés aux modèles LUTI

Clémentine PRIEUR & Elise ARNAUD

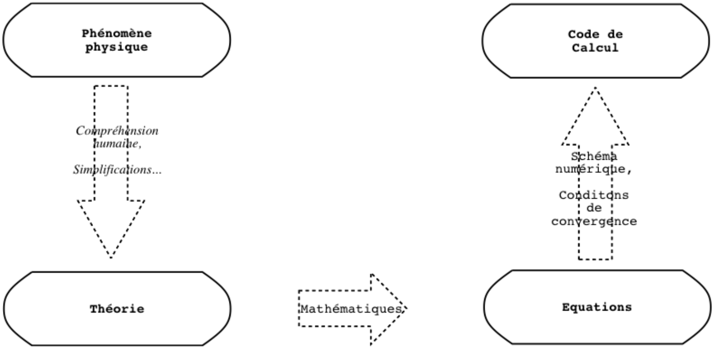
Université Joseph Fourier
Laboratoire Jean Kuntzmann, Equipes/Projets INRIA MOISE & STEEP

Grenoble, le 23 janvier 2013

Plan de l'exposé

Plan de l'exposé

Modèles numériques



[figure extraite de la thèse de Julien Jacques]

Modèles numériques

Mise en place d'un modèle numérique :

- Collecte de données sur le phénomène à modéliser
- Instantiation d'un modèle : structure, choix des équations, ...
- Calage des paramètres du modèle sur les données

Modèles numériques

Mise en place d'un modèle numérique :

- Collecte de données sur le phénomène à modéliser
- Instantiation d'un modèle : structure, choix des équations, ...
- Calage des paramètres du modèle sur les données

Usages d'un modèle :

- Description du phénomène
- Prospective / simulations : si possible, avec une caractérisation de l'incertitude sur le résultat
- Optimisation

Modèles numériques

Mise en place d'un modèle numérique :

- Collecte de données sur le phénomène à modéliser
- Instantiation d'un modèle : structure, choix des équations, . . .
- Calage des paramètres du modèle sur les données

Usages d'un modèle :

- Description du phénomène
- Prospective / simulations : si possible, avec une caractérisation de l'incertitude sur le résultat
- Optimisation

Validation :

- Même un calage "parfait" peut donner lieu à des prévisions fausses :
  - modèle inadéquat (ne correspond pas à la réalité du phénomène)
  - données incertaines, trop peu de données
- Nécessité de valider, p.ex. confronter des prévisions à des observations et/ou des dires d'experts

Schéma global

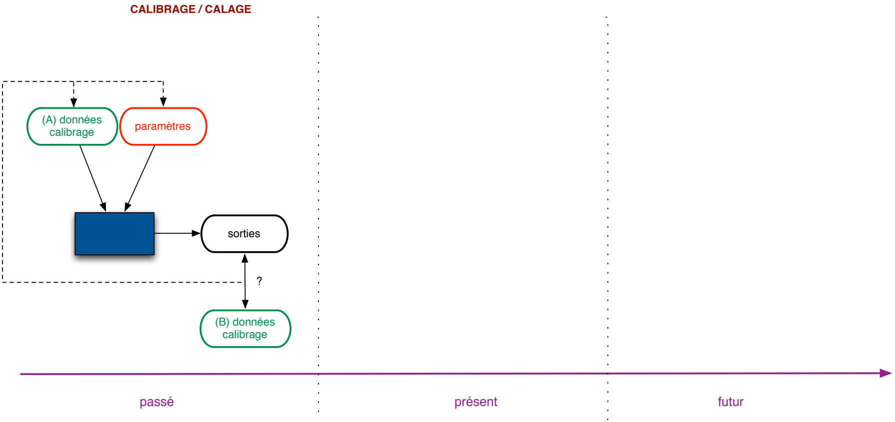


Schéma global

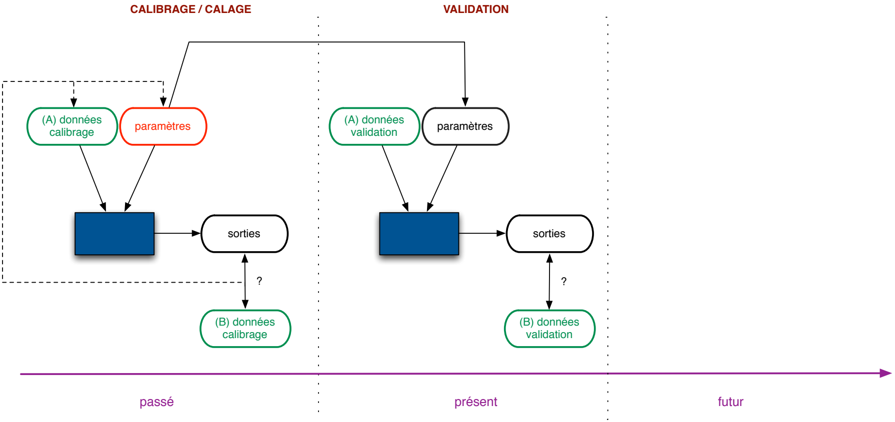
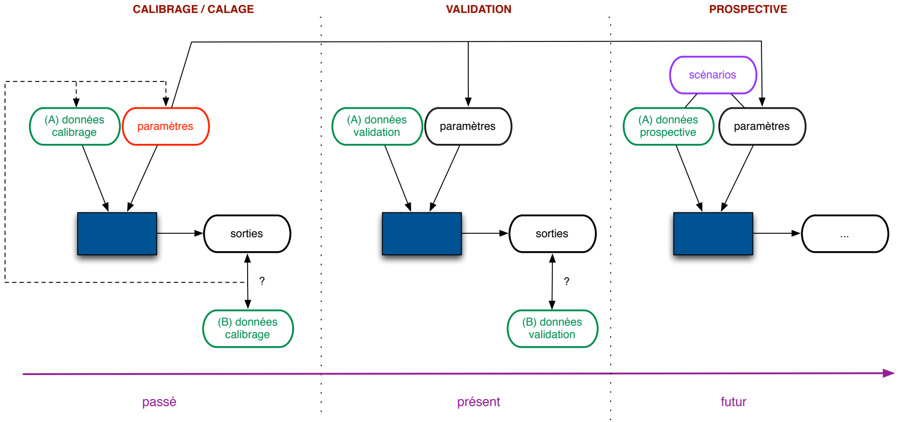


Schéma global



Analyse de sensibilité, à quels niveaux?

Etape de calibration : $Y = f(X = \{D, \rho\})$

- $D = \{D_A, D_B\}$: les données
  - D_A : données utilisées en entrée du modèle (ici les prix du foncier, les données exogènes, etc.)
  - D_B : données du même type que Y (ici l'ensemble des productions)
- $\rho = \{h, p\}$ les inconnues
  - h : ensemble des paramètres de contrôle
  - p : ensemble des paramètres économiques (elasticité, production min et max, etc.)

$$(\hat{h}, \hat{p}) = \arg\min_{h,p} \|D_B - f(D_A, h, p)\|_2$$

sous contraintes sur p

Effectuer une AS afin de réduire l'espace des paramètres sur lequel on fait la calibration. On cherche à déterminer par une AS les paramètres les moins influents et on les fixe à une valeur nominale.

Analyse de sensibilité, à quels niveaux?

Etape de validation : une fois le modèle calibré, on peut vérifier qu'il est "valide".

Plusieurs approches sont envisageables : validation historique, validation par AS.

Principe de la validation par AS : proposer différents scénarios pour lesquels on attend une certaine réponse, voir si les paramètres influents sous tel ou tel scénario sont bien ceux attendus.

Analyse de sensibilité, à quels niveaux?

L'analyse de sensibilité comme outil d'aide à la décision?

On cherchera à définir des indicateurs pertinents pour les "décideurs" (congestion du traffic, qualité de l'air, . . .).

But de l'AS : déterminer si ces indicateurs sont plus sensibles à certaines entrées qu'à d'autres.

Utiliser les résultats de l'AS pour proposer des orientations d'aménagement du territoire.

Plan de l'exposé

Plus généralement, qu'est-ce qu'une analyse de sensibilité?

Modèle : $Y = f(\mathbf{X} := (X_1, \ldots, X_d))$

Objectif : déterminer comment la sortie du code f réagit aux variations de ses entrées $\mathbf{X}$.

Plus généralement, qu'est-ce qu'une analyse de sensibilité?

Modèle : $Y = f(\mathbf{X} := (X_1, \ldots, X_d))$

Objectif : déterminer comment la sortie du code f réagit aux variations de ses entrées $\mathbf{X}$.

Plusieurs classes de méthodes :

- méthodes de criblage (screening) : elles permettent d'opérer un premier tri à faible coût des variables d'entrée;
- indices de sensibilité, permettant une hierarchisation des facteurs d'entrée.

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

AS locale versus AS globale

- Approche variationnelle (dérivées, adjoint, sensibilités locales)

$$\eta(X) = \eta(X^0) + \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{\partial \eta}{\partial X_i}\right)_{X^0} (X_i - X_i^0) \text{ (hypothèse de linéarité)}$$

Adaptée à d élevé (coût d'un calcul adjoint indépendant de d).

AS locale versus AS globale

- Approche variationnelle (dérivées, adjoint, sensibilités locales)

$$\eta(X) = \eta(X^0) + \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{\partial \eta}{\partial X_i} \right)_{X^0} (X_i - X_i^0) \text{ (hypothèse de linéarité)}$$

  Adaptée à d élevé (coût d'un calcul adjoint indépendant de d).

- Approche stochastique (échantillonnage Monte Carlo)
  Méhode "boîte noire", simple et souple.
  $\rightarrow$ méthodes probabilistes et plans d'expériences spécifiques pour réduire le coût.

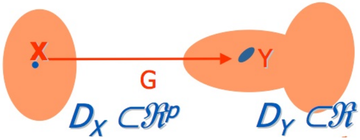


Figure: Locale versus Globale ($G := \eta$), illustration.

AS globale

Les entrées peuvent être des scalaires, mais également des fonctions (évolution du prix d'un produit sur une année), des cartes (carte de répartition des logements sociaux).

L'AS globale prend en compte la loi des entrées. Exemple pour des entrées scalaires :

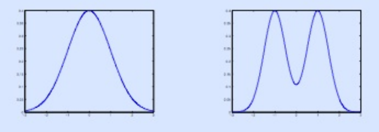


Figure: loi (gauche) unimodale, (droite) bimodale

Le tout est de pouvoir échantillonner selon la loi des entrées.

Principe général de l'ANOVA fonctionnelle

$Y = \eta(X_1, \ldots, X_d)$, entrées indépendantes

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

$V(Y|X_i = x_i)$, comment choisir x_i?

Principe général de l'ANOVA fonctionnelle

$Y = \eta(X_1, \ldots, X_d)$, entrées indépendantes

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

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

Principe général de l'ANOVA fonctionnelle

$Y = \eta(X_1, \ldots, X_d)$, entrées indépendantes

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

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

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

Théorème de la variance totale, indice de Sobol

$Y \in \mathbb{R}$, $X \in \mathbb{R}^k$,

$$V(Y) = V\left[E\left(Y|X\right)\right] + E\left[V\left(Y|X\right)\right]$$

Définition

Indice de Sobol du premier ordre : $i = 1, \ldots, d$

$$S_i = \frac{V\left[E\left(Y|X_i\right)\right]}{V(Y)}$$

Indices de Sobol d'ordre supérieur

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall\, i = 1, \ldots, d \;\; S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{V(Y)}$$

$$\forall\, i \neq j \;\; S_{i,j} = \frac{V\big[E\big(Y|X_i,X_j\big)\big] - V[E(Y|X_i)] - V\big[E\big(Y|X_j\big)\big]}{V(Y)}$$

$$\ldots$$

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

Indices de Sobol d'ordre supérieur

Définition (Indices de Sobol)

$$\forall\, i = 1, \ldots, d \;\; S_i = \frac{V[E(Y|X_i)]}{V(Y)}$$

$$\forall\, i \neq j \;\; S_{i,j} = \frac{V\big[E\big(Y|X_i,X_j\big)\big] - V[E(Y|X_i)] - V\big[E\big(Y|X_j\big)\big]}{V(Y)}$$

$$\ldots$$

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

Définition (Indices totaux)

$$i = 1, \ldots, d \qquad S_{T_i} = \sum_{u \subset \{1,\ldots,d\}\,,\; u \neq \emptyset\,,\; i \in u} S_u\;.$$

Indices de Sobol

Définition (Indices totaux)

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

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

En utilisant le théorème de la variance totale,

$$S_{T_i} = 1 - \frac{V\left[E\left(Y|X_{(-i)}\right)\right]}{V(Y)} = \frac{E\left[V\left(Y|X_{(-i)}\right)\right]}{V(Y)} \; .$$

Plan de l'exposé

Cette approche est a priori la plus indiquée lorsqu'on a très peu d'hypothèses de régularité sur le modèle, et lorsque les entrées sont de nature variée (cartes, scalaires, . . .).

Monte-Carlo "Pick & Freeze" :

$\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_d)$

$(\mathbf{X}^k)_{k=1,\ldots,N}$, $(\tilde{\mathbf{X}}^k)_{k=1,\ldots,N}$

$Y_k = \eta(\mathbf{X}^k)$, $\tilde{Y}_k^i = \eta(\tilde{X}_1^k, \ldots, \tilde{X}_{i-1}^k, {X^k}_i, \tilde{X}_{i+1}^k, \ldots, \tilde{X}_d^k)$

$$\hat{S}_{i,N} = \frac{1/N \sum_{k=1}^N Y_k \tilde{Y}_k^i - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)\left(1/N \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k^i\right)}{1/N \sum_{k=1}^N Y_k^2 - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)^2}$$

Monte-Carlo "Pick & Freeze" :

$\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_d)$

$(\mathbf{X}^k)_{k=1,\ldots,N}$, $(\tilde{\mathbf{X}}^k)_{k=1,\ldots,N}$

$Y_k = \eta(\mathbf{X}^k)$, $\tilde{Y}_k^i = \eta(\tilde{X}_1^k, \ldots, \tilde{X}_{i-1}^k, {X^k}_i, \tilde{X}_{i+1}^k, \ldots, \tilde{X}_d^k)$

$$\hat{S}_{i,N} = \frac{1/N \sum_{k=1}^N Y_k \tilde{Y}_k^i - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)\left(1/N \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k^i\right)}{1/N \sum_{k=1}^N Y_k^2 - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)^2}$$

Approche Monte-Carlo

Monte-Carlo "Pick & Freeze" :

$\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_d)$

$(\mathbf{X}^k)_{k=1,\ldots,N}$, $(\tilde{\mathbf{X}}^k)_{k=1,\ldots,N}$

$Y_k = \eta(\mathbf{X}^k)$, $\tilde{Y}_k^i = \eta(\tilde{X}_1^k, \ldots, \tilde{X}_{i-1}^k, {X^k}_i, \tilde{X}_{i+1}^k, \ldots, \tilde{X}_d^k)$

$$\hat{S}_{i,N} = \frac{1/N \sum_{k=1}^N Y_k \tilde{Y}_k^i - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)\left(1/N \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k^i\right)}{1/N \sum_{k=1}^N Y_k^2 - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)^2}$$

Pour calculer tous les indices d'ordre 1, il faut $N(1+d)$ évaluations de η.
Convergence Monte-Carlo en $\sqrt{N}$, N doit être grand.

Monte-Carlo "Pick & Freeze" :

$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$

$(\mathbf{X}^k)_{k=1,\dots,N}$, $(\tilde{\mathbf{X}}^k)_{k=1,\dots,N}$

$Y_k = \eta(\mathbf{X}^k)$, $\tilde{Y}_k^i = \eta(\tilde{X}_1^k, \dots, \tilde{X}_{i-1}^k, {X^k}_i, \tilde{X}_{i+1}^k, \dots, \tilde{X}_d^k)$

$$\hat{S}_{i,N} = \frac{1/N \sum_{k=1}^N Y_k \tilde{Y}_k^i - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)\left(1/N \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k^i\right)}{1/N \sum_{k=1}^N Y_k^2 - \left(1/N \sum_{k=1}^N Y_k\right)^2}$$

Pour calculer tous les indices d'ordre 1, il faut $N(1+d)$ évaluations de η. Convergence Monte-Carlo en $\sqrt{N}$, N doit être grand.

Saltelli (Computer Physics Communications '02) $(2d+2)N$ pour ordres 1 et 2 + totaux.

Métamodélisation

Cadre : une évaluation de f reste trop coûteuse.

Métamodèle : on approche f par un modèle beaucoup plus rapide à implémenter.

Quelques exemples : régression linéaire, non linéaire, modèle additif, krigeage (processus Gaussiens, interpolation optimale)

Mais aussi, des métamodèles qui tiennent compte de la physique du modèle initial (intrusifs), par exemple bases réduites.

Plan de l'exposé

Conclusions, perspectives

Conclusions :

• L'ANOVA fonctionnelle définit de façon univoque des indices de sensibilité.

• Il existe plusieurs méthodes d'estimation de ces indices, s'ils ne sont pas calculables analytiquement.

• L'approche métamodèle permet l'AS de modèles même coûteux.

Conclusions, perspectives

Conclusions :

• L'ANOVA fonctionnelle définit de façon univoque des indices de sensibilité.
• Il existe plusieurs méthodes d'estimation de ces indices, s'ils ne sont pas calculables analytiquement.
• L'approche métamodèle permet l'AS de modèles même coûteux.

Problèmes spécifiques à l'AS sur modèles LUTI :

• Bien spécifier la sortie Y (indicateur pour l'aide à la décisison, fonction de coût pour la calibration, . . .).
• Que faire avec des facteurs corrélés? Cela reste un vrai problème ouvert. Pour l'instant le mieux c'est de respécifier le modèle quand c'est possible.
• Comment bien échantillonner les entrées spatiales (cartes de prix par exemple)?

Conclusions, perspectives

Conclusions :

• L'ANOVA fonctionnelle définit de façon univoque des indices de sensibilité.

• Il existe plusieurs méthodes d'estimation de ces indices, s'ils ne sont pas calculables analytiquement.

• L'approche métamodèle permet l'AS de modèles même coûteux.

Problèmes spécifiques à l'AS sur modèles LUTI :

• Bien spécifier la sortie Y (indicateur pour l'aide à la décisison, fonction de coût pour la calibration, . . .).

• Que faire avec des facteurs corrélés? Cela reste un vrai problème ouvert. Pour l'instant le mieux c'est de respécifier le modèle quand c'est possible.

• Comment bien échantillonner les entrées spatiales (cartes de prix par exemple)?

Merci de votre attention !