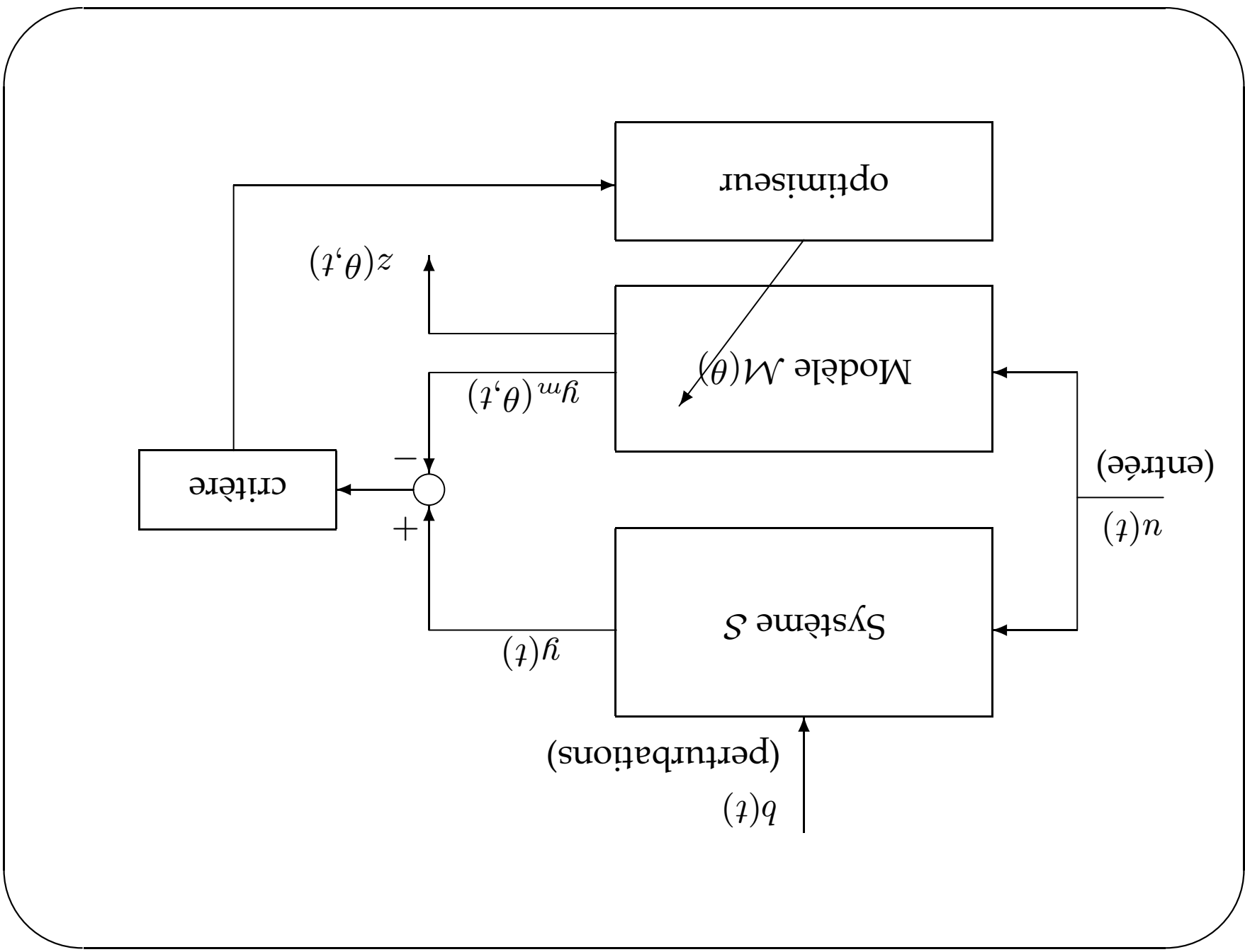


PLANIFICATION D'EXPERIENCES

Luc Pronzato, 2004

- 1 Objectifs, exemples
- 2 Critères de planification
- 3 Construction de $M(\theta, \xi)$
- 4 Planification exacte
- 5 Planification «approximative»
- 6 Algorithmes pour planification approximative
- 7 Discrimination entre structures de modèles
- 8 Difficultés dues à la non linéarité
- 9 Quelques réponses
- 10 Systèmes dynamiques : entrées optimales



1) Objectifs, exemples

1.1) Estimation de paramètres

Ex1 : Pesée de trois objets, balance à un seul plateau [Pázman, 1986]

Trois objets de masses m_1, m_2, m_3

Observation pour un objet de masse m : $y = m + m_0 + \epsilon$

avec m_0 l'erreur systématique de la balance et ϵ une erreur de mesure,

$$E\{\epsilon\} = 0, \text{var}\{\epsilon\} = \sigma^2$$

Les erreurs pour différentes pesées sont supposées i.i.d.

Méthode 1 : on pèse chaque objet séparément $\rightarrow y(i) = m_i + m_0 + \epsilon_i$,

$i = 1, 2, 3$, et on fait une pesée «à vide» $y(0) = m_0 + \epsilon_0$

Masses estimées : $\hat{m}_i = y(i) - y(0) = m_i + \epsilon_i - \epsilon_0$, et donc

$\rightarrow E\{\hat{m}_i\} = m_i, i = 1, 2, 3$ (pas de biais),

$\rightarrow \text{var}\{\hat{m}_i\} = 2\sigma^2, i = 1, 2, 3$

$\rightarrow \text{cov}(\hat{m}_i, \hat{m}_j) = \sigma^2, i, j = 1, 2, 3, i \neq j$

Méthode 2 : (même nb. de pesées que la méthode 1) on pèse chaque objet

séparément $\rightarrow y(i) = m_i + m_0 + \epsilon_i, i = 1, 2, 3$, et on fait une pesée «à

plein» $y(0) = m_1 + m_2 + m_3 + m_0 + \epsilon_0$

Masses estimées : $\hat{m}_i = [y(i) + y(0) - y(j) - y(k)]/2, i = 1, 2, 3, i \neq j,$

$i \neq k, j \neq k$, et donc

$\rightarrow E\{\hat{m}_i\} = m_i, i = 1, 2, 3$ (pas de biais),

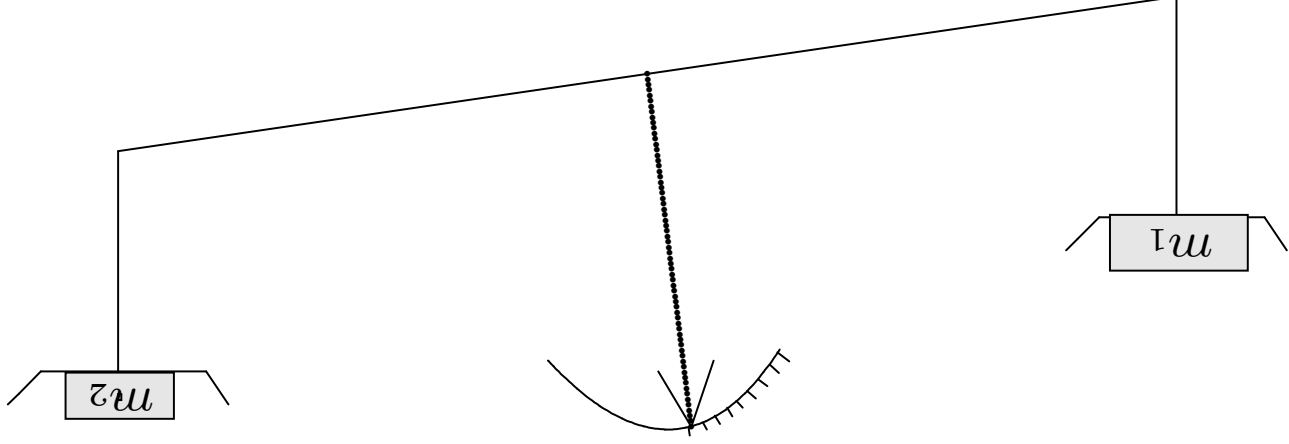
$\rightarrow \text{var}\{\hat{m}_i\} = \sigma^2, i = 1, 2, 3$

$\rightarrow \text{cov}(\hat{m}_i, \hat{m}_j) = 0, i, j = 1, 2, 3, i \neq j$

Méthode 2 \rightarrow plus grande précision, pas de corrélation entre les estimées

Ex2: Pesée de huit objets, balance à 2 plateaux

$$y = m_1 - m_2 + \epsilon$$



8 objets à peser, de masses $m_i, i = 1, \dots, 8$, les erreurs ϵ_i sont i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

Méthode 1 : on pèse chaque objet séparément $\rightarrow y(i) = m_i + \epsilon_i, i = 1, \dots, 8, \rightarrow$ masses estimées : $\hat{m}_i = y(i) \sim \mathcal{N}(m_i, \sigma^2)$

On refait 8 fois chaque pesée, on prend la moyenne :

$$\hat{\hat{m}}_i = \bar{y}(i) \sim \mathcal{N}(m_i, \sigma^2/8) \text{ (avec 64 pesées...)}$$

Méthode 2 : on répartit les masses astucieusement ...

et $\hat{m}_i \sim \mathcal{N}(m_i, \sigma^2/8)$ avec seulement 8 pesées !

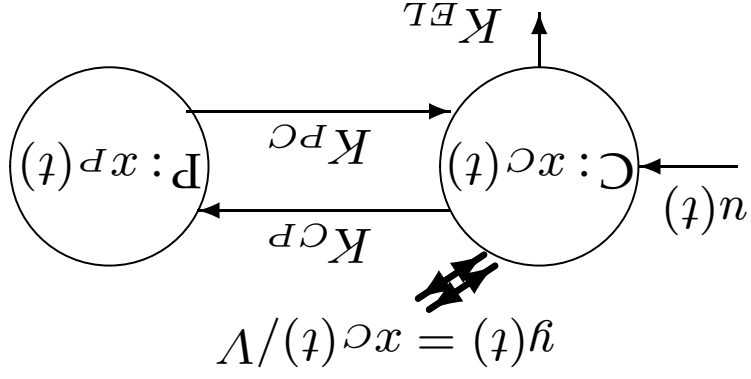
$$\hat{m}_1 = \frac{y(1) + y(2) + y(3) + y(4) - y(5) - y(6) - y(7) - y(8)}{8}$$

$$= m_1 + \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 - \epsilon_8}{8}$$

Estimation \rightarrow par exemple,

$$\begin{aligned} y(1) &= m_1 + m_2 + m_3 + m_4 + m_5 + m_6 + m_7 + m_8 + \epsilon_1 \\ y(2) &= m_1 + m_2 + m_3 - m_4 - m_5 - m_6 - m_7 + m_8 + \epsilon_2 \\ y(3) &= m_1 - m_2 - m_3 + m_4 + m_5 - m_6 - m_7 + m_8 + \epsilon_3 \\ y(4) &= m_1 - m_2 - m_3 - m_4 - m_5 + m_6 + m_7 + m_8 + \epsilon_4 \\ y(5) &= -m_1 + m_2 - m_3 + m_4 - m_5 + m_6 - m_7 + m_8 + \epsilon_5 \\ y(6) &= -m_1 + m_2 - m_3 - m_4 + m_5 - m_6 + m_7 + m_8 + \epsilon_6 \\ y(7) &= -m_1 - m_2 + m_3 + m_4 - m_5 - m_6 + m_7 + m_8 + \epsilon_7 \\ y(8) &= -m_1 - m_2 + m_3 - m_4 + m_5 + m_6 - m_7 + m_8 + \epsilon_8 \end{aligned}$$

Ex3: [D'Argenio, 1981], modèle à 2 compartiments.

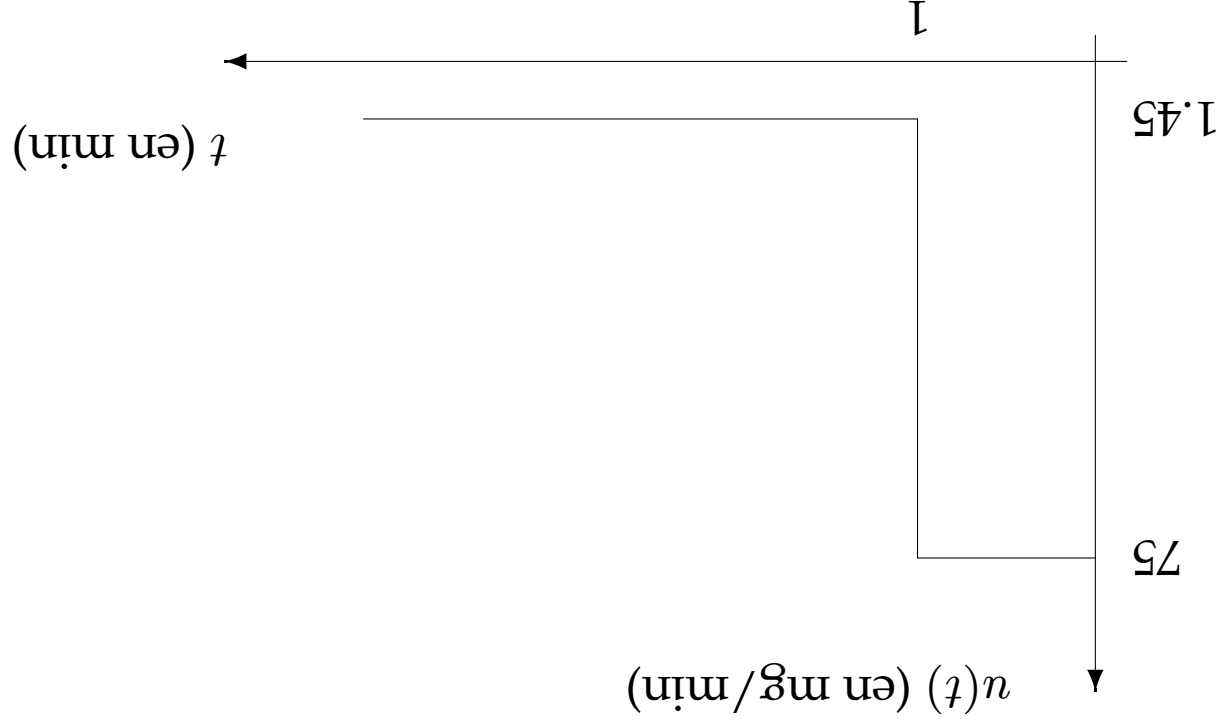


→ système d'équations différentielles linéaires :

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_C(t)}{dt} &= -(K_{CP} + K_{EL})x_C(t) + K_{PC}x_P(t) + u(t) \\ \frac{dx_P(t)}{dt} &= K_{CP}x_C(t) - K_{PC}x_P(t) \end{aligned} \right\}$$

avec observations de la concentration dans C : $y(t) = x_C(t)/V + \epsilon(t)$, où les $\epsilon(t)$ sont i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $\sigma = 0.2 \mu\text{g/ml}$

L'entrée $u(t)$ a la forme suivante :



Les paramètres inconnus sont $\theta = (K_{CP}, K_{PC}, K_{EL}, V)$

← expériences simulées avec les paramètres

$$\bar{\theta} = (0.066 \text{ min}^{-1}, 0.038 \text{ min}^{-1}, 0.0242 \text{ min}^{-1}, 301)$$

Variables expérimentales : ξ_i = instants t_i des prélèvements

$$1 \leq t_i \leq 720 \text{ min}$$

• protocole «conventionnel» :

$$t = (5, 10, 30, 60, 120, 180, 360, 720) \text{ (en min) .}$$

• protocole «optimal» (pour θ) :

$$t = (1, 1, 10, 10, 74, 74, 720, 720) \text{ (en min)}$$

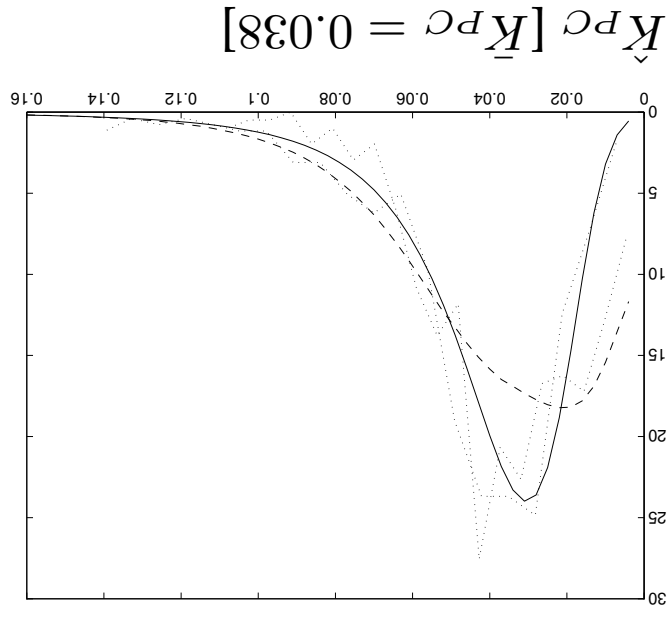
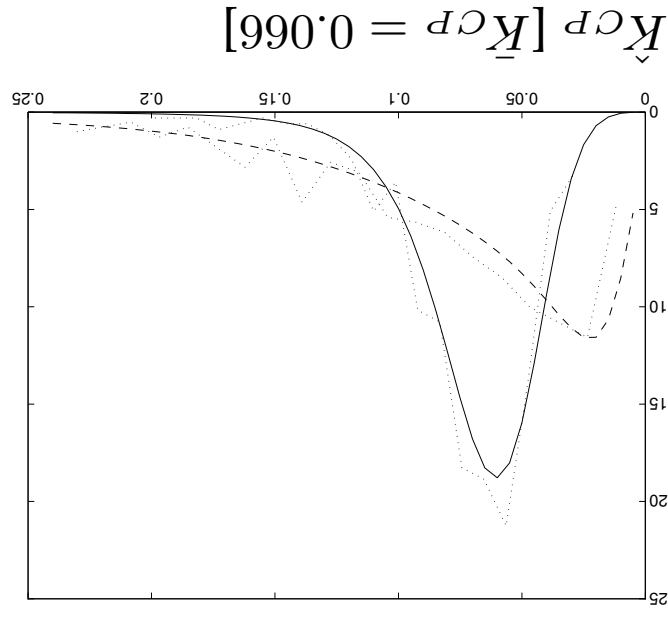
(en supposant que l'on puisse faire des dosages indépendants à un même instant)

→ 400 simulations

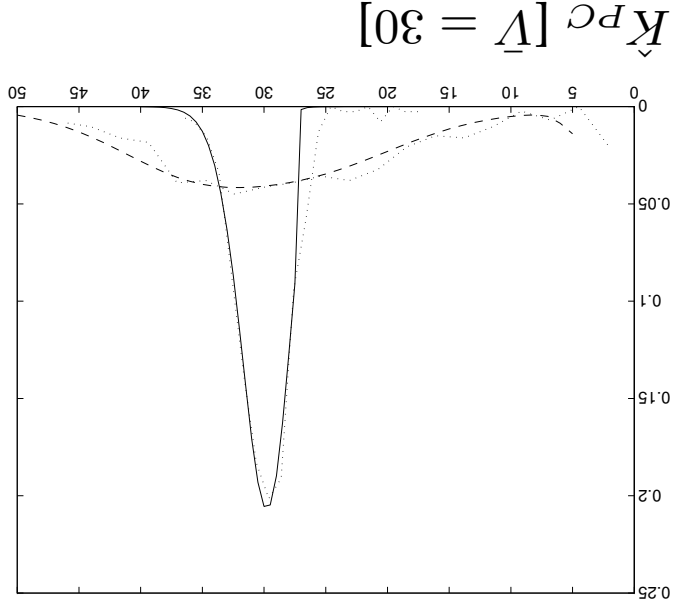
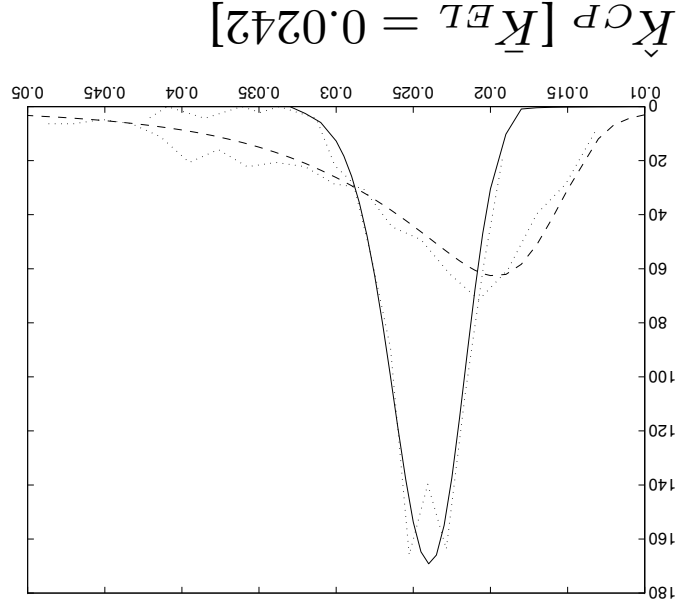
→ 400 lots de 8 observations pour chaque protocole

→ 400 estimations de paramètres (moindres carrés) ...

Densités marginales (approximée et empirique) pour les 2 protocoles
 (optimal —, conventionnel - - -)



Densités marginales (approximée et empirique) pour les 2 protocoles
 (optimal —, conventionnel - - -)



«optimal» → plus grande précision

1.2) Discrimination entre structures de modèles

Ex4: [Box & Hill, 1967]: réaction chimique $A \rightarrow B$,

2 variables expérimentales : $\mathbf{x} =$ (temps t , température T), réaction du 1er, 2ème, 3ème ou 4ème ordre?

→ 4 structures de modèles :

$$\begin{aligned} y_m^{(1)}(\theta_1, \mathbf{x}) &= \exp[-\theta_{11} t \exp(-\theta_{12}/T)], \\ y_m^{(2)}(\theta_2, \mathbf{x}) &= \frac{1 + \theta_{21} t \exp(-\theta_{22}/T)}{1}, \\ y_m^{(3)}(\theta_3, \mathbf{x}) &= \frac{1 + 2\theta_{31} t \exp(-\theta_{32}/T)}{1}^{1/2}, \\ y_m^{(4)}(\theta_4, \mathbf{x}) &= \frac{1 + 3\theta_{41} t \exp(-\theta_{42}/T)}{1}^{1/3}. \end{aligned}$$

Observations : structure 2, $y(j) = y_m^{(2)}(\bar{\theta}_2, \mathbf{x}_j) + \epsilon_j$,

avec $\bar{\theta}_2 = (400, 5000)^\top$ la vraie valeur (inconnue) des paramètres du

modèle 2, $(\epsilon_j)_j$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $\sigma = 0.05$

Domaine expérimental admissible : $0 \leq t \leq 150, 450 \leq T \leq 600$

Approche *séquentielle* : après observation des $y(j) = y(\mathbf{x}_j), j = 1, \dots, k,$

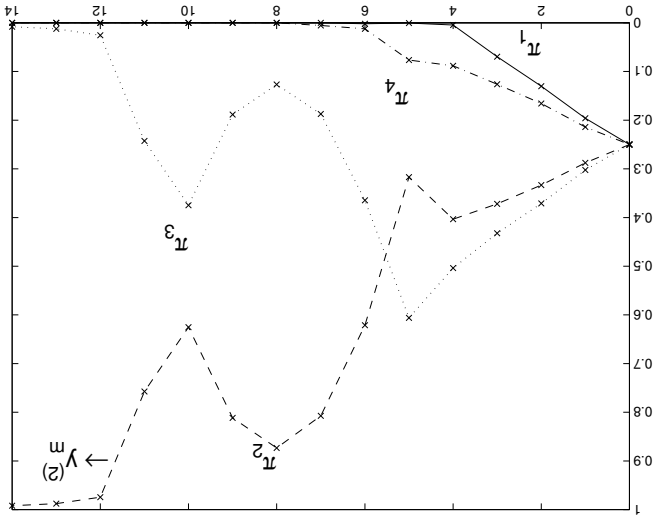
• estimation des θ_i^k par moindres carrés

• évaluation de la probabilité $\pi_i(k)$ que le modèle i soit correct

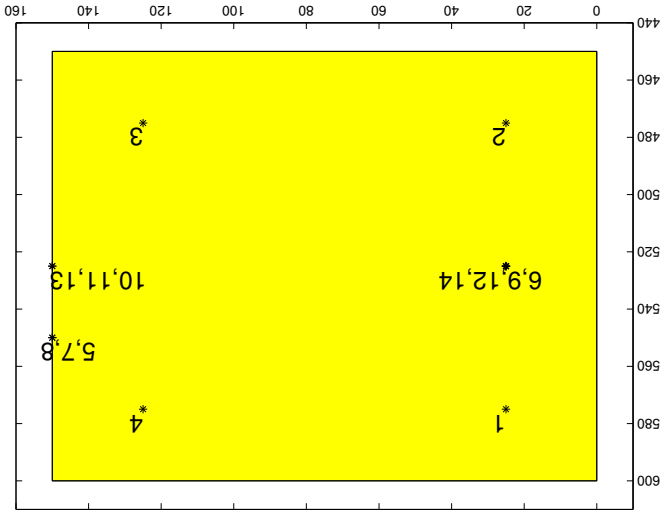
pour $i = 1, \dots, 4$

Initialisation : $\pi_i(0) = 1/4, i = 1, \dots, 4$ et $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_4$ fixés (plan initial)

évolution des probabilités $\pi_i(k)$



points d'observation x_k



1.3) Maximisation d'une réponse

Observations $y(i) = y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x}_i) + \epsilon_i$, erreurs $(\epsilon_i)_i$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

Objectif : maximiser $\mathbb{E}\{y\} = y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x}^*)$, c'est-à-dire déterminer

$$\mathbf{x}^* = \arg \max_{\mathbf{x}} y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x})$$

... mais on ne connaît pas $\bar{\theta}$!

→ estimer $\hat{\theta} = \hat{\theta}[y]$, puis utiliser $\mathbf{x}^*(\hat{\theta})$

Quelle expérience pour estimer $\hat{\theta}$? Plusieurs objectifs possibles :

☞ 1) avoir une bonne précision sur θ ,

☞ 2) avoir une bonne précision sur $\mathbf{x}^*(\theta)$,

☞ 3) définir un coût $C(\theta|\bar{\theta})$, par exemple

$$C(\theta|\bar{\theta}) = y_m[\bar{\theta}, \mathbf{x}^*(\bar{\theta})] - y_m[\bar{\theta}, \mathbf{x}^*(\theta)]$$

et minimiser son espérance → risque bayésien R (loi a priori $\pi(\theta)$)

$$R = \mathbb{E}_{y, \theta} \{C(\theta|y)|\bar{\theta}\}$$

Si $y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x})$ linéaire en θ quadratique en \mathbf{x} , on peut faire les calculs

Ex5:

$$y_m(\theta, \mathbf{x}) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \frac{1}{2} \theta_3 x_1^2 + \frac{1}{2} \theta_4 x_2^2 + \theta_5 x_1 x_2$$

$$= \theta_0 + \mathbf{q}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x}$$

avec $x_1, x_2 \geq 0$ et $x_1 + x_2 \leq 1$

$R \rightarrow$ critère de L_B -optimalité, voir + loin

Approche précédente : en 2 étapes,

(1) choix des \mathbf{x}_i pour l'estimation, (2) utilisation de $\mathbf{x}^*(\theta)$ fixé

On pourrait aussi s'intéresser à la construction d'une suite de \mathbf{x}_i telle que chacun d'entre eux soit «aussi proche que possible» de $\mathbf{x}^*(\theta)$

[«maximiser chaque $y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x}_i)$ » \leftarrow **commande extrême** (automatique)]

\leftarrow **planification séquentielle**

$\dots \leftarrow$ nouveau $\mathbf{x}_i \leftarrow$ nouvelle observation $y(i) \leftarrow$ nouvelle estimée $\hat{\theta}_i = \hat{\theta}(y_i^1) \leftarrow$ nouveau $\mathbf{x}_{i+1} \leftarrow \dots$

Stratégie proposée :

$$\mathbf{x}_{k+1} = \arg \max_{\mathbf{x}} y_m(\hat{\theta}_k, \mathbf{x}) + \alpha_k \mathbf{f}_{\perp}^k(\mathbf{x}) \mathbf{M}_{\perp}^k(\mathbf{x}) \mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{x}) \text{ avec}$$

$$- \mathbf{M}^k = \sum_{i=1}^I \mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}_{\perp}^T(\mathbf{x}_i),$$

- $\hat{\theta}_k$ estimée de θ (MC) après k observations y_1, \dots, y_k ,

- $(\alpha_k)_k$ une suite de pondérations

On montre que si $(\alpha_k/k) \log \alpha_k \searrow$ et $\alpha_k / (\log k)^{1+\delta} \searrow \infty$, $\delta > 0$, alors, quand $k \rightarrow \infty$,

- $\hat{\theta}_k \xrightarrow{\text{p.s.}} \theta$

- $(1/k) \sum_{i=1}^I y_m(\hat{\theta}_k, \mathbf{x}_i) \xrightarrow{\text{p.s.}} y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x}_*)$

- $\xi_k \rightarrow \delta \mathbf{x}_*$ p.s. (cv. faible, ξ_k mesure empirique des \mathbf{x}_i)

$\alpha_k = \alpha_k$: excitation trop forte (compromis estimation/optimisation)

insuffisante

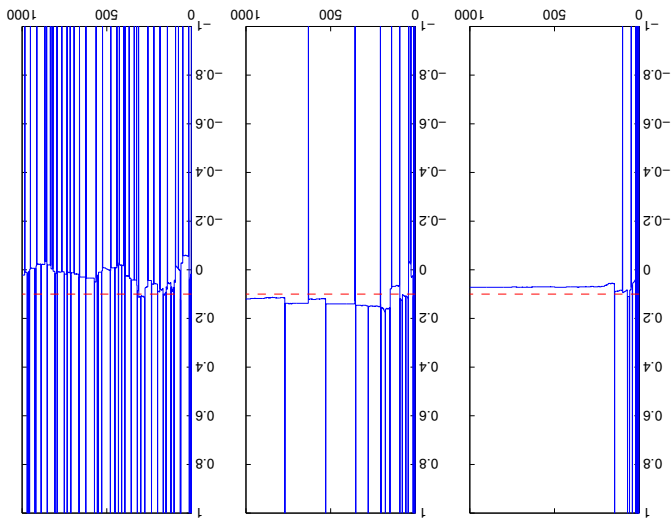
$\alpha_k = \alpha$ constant proposé par Astrom & Wittenmark (1989) : excitation

$$[\log \lambda_{\max}(\mathbf{M}^k)]_{1+\delta} = o[\lambda_{\min}(\mathbf{M}^k)], \delta > 0$$

[Lai & Wei, 1982] : $\lambda_{\min}(\mathbf{M}^k) \rightarrow \infty$ ne suffit pas :

Suite (\mathbf{x}_i) ? et \mathbf{x}^*

$$\alpha_k = \alpha \text{ ct.} \quad \alpha_k = \alpha (\log k)^2 \quad \alpha_k = \alpha_k$$



2) Critères de planification

On traitera (presque) exclusivement de la planification **pour l'estimation** avec estimation par **maximum de vraisemblance**

Rappel :

$$\sqrt{N}(\hat{\theta}_{MV} - \bar{\theta}) \underset{N \rightarrow \infty}{\sim} \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M}^{-1}(\bar{\theta}, \xi_N^I))$$

→ Critère : fonction scalaire de la matrice d'information de Fisher (moyenne, par observation)

ξ_N^I «expérience» : caractérise les conditions expérimentales x_i utilisées pour les N observations (temps d'observation, pression, température, forme de l'entrée, etc.)

Domaine expérimental → contraintes sur $\xi_N^I : x_i \in \mathcal{X}$, parfois (souvent) \mathcal{X} est fini, $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_M\}$, avec M grand Critère à optimiser ?

$$[\text{Kiefer, 1974}] : \Phi[\mathbf{M}(\bar{\theta}, \bar{\xi})] = \begin{cases} \frac{1}{p} \text{trace}[(\hat{\mathbf{Q}}\mathbf{M}^{-1}(\bar{\theta}, \bar{\xi})\hat{\mathbf{Q}}_{\top})^k]^{1/k} & \text{si } \det \mathbf{M} \neq 0 \\ \infty & \text{sinon} \end{cases}$$

avec $\hat{\mathbf{Q}} \succeq \mathbf{0}$ une matrice de pondération ($\Phi(\mathbf{M})$ à minimiser)

Rq : Si estimateur bayésien, $\mathbf{M}(\bar{\theta}, \bar{\xi})$ est remplacée par $\mathbf{M}(\bar{\theta}, \bar{\xi}) + \Omega^{-1}/N$, avec Ω mat. de cov. *a priori* pour θ

$k = 1 \rightarrow L$ -optimalité : $\Phi(\mathbf{M}) = \text{trace}[\hat{\mathbf{Q}}_{\top} \hat{\mathbf{Q}} \mathbf{M}^{-1}]$

$k = 1$ et $\hat{\mathbf{Q}} = \mathbf{I}_p \rightarrow A$ -optimalité : $\Phi(\mathbf{M}) = \text{trace}[\mathbf{M}^{-1}]$

A -optimalité : minimise la somme des longueurs des axes des ellipsoïdes de confiance asymptotique sur θ

Région de confiance :

$$\mathcal{R}(\hat{\theta}, \alpha) = \{ \theta \mid (\theta - \hat{\theta})^\top \mathbf{M}(\hat{\theta}, \hat{\xi}_N^1) (\theta - \hat{\theta}) \leq R_\alpha / N \}$$

Modèle LP, un bruit $(\epsilon_i)_{i \geq 1}$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $R_\alpha = \chi_2^\alpha(p)$ valeur ayant la

probabilité $\alpha\%$ d'être dépassée par une variable distribuée suivant une loi du χ^2 à p degrés de liberté (\exists tables) \rightarrow

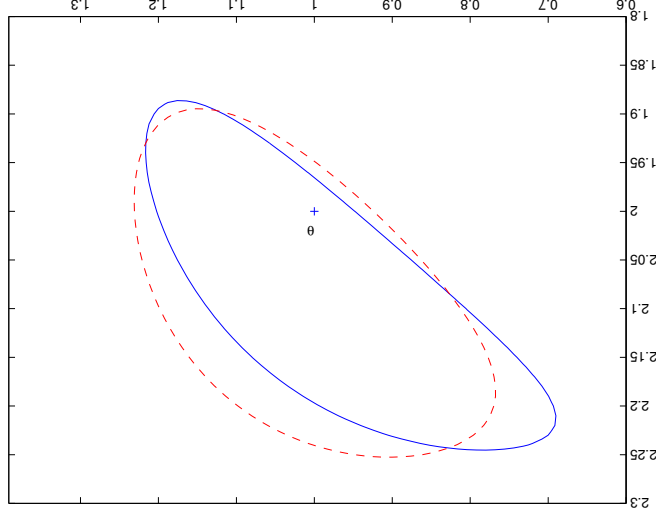
$$\text{Prob}\{\bar{\theta} \in \mathcal{R}(\hat{\theta}, \alpha)\} = \alpha$$

[Si modèle non LP, approximations (région non ellipsoïdale, niveau de confiance approché, approximation locale puisque dépendance en θ , justifié asymptotiquement $N \rightarrow \infty$, voir + loin)]

Ex6: $y_m(\theta, \mathbf{x}) = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3^1 (1 - x_1) + \theta_2^2 (1 - x_2)$
 $\hat{y}(i) = y_m(\theta, \mathbf{x}_i) + \epsilon_i$, avec $(\epsilon_i)_i$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, 0.25)$
 $\bar{\theta} = (1, 2)^\top$

3 observations, en $\mathbf{x}_1 = (1, 1)^\top$,
 $\mathbf{x}_2 = (0, 1)^\top$ et $\mathbf{x}_3 = (1, 0)^\top$,
 $\mathbf{y} = (3.3354, 3.1818, 5.3303)^\top$

3 observations, en $\mathbf{x}_1 = (0, 0)^\top$,
 $\mathbf{x}_2 = (0, 1)^\top$ et $\mathbf{x}_3 = (1, 0)^\top$,
 $\mathbf{y} = (5.3354, 3.1818, 5.3303)^\top$



Régions de confiance à 95% et $\bar{\theta}$

$k = 1$ et $\mathbf{Q} = \text{diag}\{1/\theta_1, \dots, 1/\theta_p\} \rightarrow C\text{-optimalité}$:
 précision relative sur les θ_i

$k = 1$ et $\mathbf{Q} = \mathbf{c}^\top \rightarrow c\text{-optimalité}$: précision sur $\mathbf{c}^\top \theta$ (\rightarrow but poursuivi...)
 $k = \infty$ et $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_p \rightarrow H\text{-optimalité}$: maximise la plus petite valeur propre
 de \mathbf{M} [ou minimise la longueur du plus grand axe des ellipsoïdes de
 confiance (asymptotiques)]

$k = \infty$ et $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_p \rightarrow D\text{-optimalité}$: maximise le produit des valeurs
 propres de \mathbf{M} [ou minimise le volume des ellipsoïdes de confiance
 (asymptotiques), proportionnel à $1/\sqrt{\det \mathbf{M}}$]
 $\Phi_D(\mathbf{M}) = \det \mathbf{M}$ (ou $\log \det \mathbf{M}$), à maximiser \rightarrow **le plus utilise**
 Expérience **$D\text{-optimale}$** invariante par reparamétrisation

$$\det \mathbf{M}(\theta', \xi) = \det \mathbf{M}(\theta, \xi) \begin{pmatrix} \partial \theta' \\ \partial \theta^\perp \end{pmatrix}^{-2}$$

Le plus souvent, répétition d'un petit nombre de conditions
 expérimentales différentes (Ex3 précédent)

Chaque critère \rightarrow critère d'efficacité associé, par ex.

$$D\text{-optimalité} \rightarrow \Phi^{ED}[\mathbf{M}(\theta, \xi)] = \left(\frac{\det \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\det \mathbf{M}(\theta, \xi_D)} \right)^{1/p}$$

avec ξ_{ED} une expérience D -optimale (et donc, $\Phi^{ED}[\mathbf{M}(\theta, \xi)] \leq 1$)

D_s -optimalité: On s'intéresse à s paramètres parmi les p formant θ (les autres = *paramètres de nuisance*) $\rightarrow \theta_{\perp} = (\theta_{\perp 1}, \theta_{\perp 2})$, avec θ_1 le vecteur des s paramètres d'intérêt

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{pmatrix}$$

mais on travaille sur \mathbf{M}_{-1}^{-1} !

avec

$$\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} A_{11} &= [\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21}]^{-1} \\ A_{12} &= -[\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21}]^{-1} \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \\ A_{21} &= -\mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21} [\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21}]^{-1} \\ A_{22} &= \mathbf{M}_{22}^{-1} + \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21} [\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21}]^{-1} \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \text{maximiser } \Phi_{D_s}[\mathbf{M}(\theta, \xi)] = \det[\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{22}^{-1} \mathbf{M}_{21}]$$

3) Construction de $M(\theta, \xi)$

Si $y^{(i)} = y_m(\theta, i) + \epsilon_i$, avec $(\epsilon_i)_{i=1}^n$ i.i.d. $\pi(\epsilon)$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \frac{\partial \log \pi[y^{(i)}|\theta]}{\partial \log \pi[y^{(i)}|\theta]} \frac{\partial \theta}{\partial \theta^\top} \middle| \theta \right\} &= \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \left[\int \frac{d \log \pi(e)}{d e} \pi(e) d e \right] \frac{\partial \theta}{\partial y_m(\theta, i)} \frac{\partial \theta}{\partial \theta^\top} \\ &= \frac{1}{N} \mathcal{I}(\pi) \frac{\partial \theta}{\partial y_m(\theta, i)} \frac{\partial \theta}{\partial \theta^\top} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \mathcal{I}(\pi) \frac{\partial \theta}{\partial y_m(\theta, i)} \frac{\partial \theta}{\partial \theta^\top} \mathbf{s}_{y^{(i)}}^\top(\theta, i) \end{aligned}$$

avec $\mathbf{s}_{y^{(i)}}(\theta, i)$ la fonction de sensibilité et $\mathcal{I}(\pi)$ l'information de Fisher de la loi $\pi : \mathcal{I}(\pi) = \int \left(\frac{d \pi(e)}{d e} \right)^2 d e \pi(e) = 1/\sigma^2$

Si bruit ϵ_i pas stationnaire,

$$\mathbf{M}(\theta, \xi_N^1) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{I}(\pi_i) \mathbf{s}_y(i) \mathbf{s}_y^\top(i) (\theta, i)$$

avec π_i la loi de ϵ_i

On le supposera stationnaire dans la suite (et donc normal sans perdre en généralité : $\mathcal{I}(\pi) \rightarrow 1/\sigma^2$)

Ex1 (suite) : Pesée de trois objets, balance à un seul plateau [Pázman, 1986]
 On a $\mathbf{y} = \mathbf{R}\bar{\theta} + \epsilon$, avec $\bar{\theta} = (m_0, m_1, m_2, m_3)^\top$ et

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ r_{31} & r_{21} & r_{11} & r_{01} \\ r_{32} & r_{22} & r_{12} & r_{02} \\ r_{33} & r_{23} & r_{13} & r_{03} \end{pmatrix}$$

$r_{ij} = 1 \Leftrightarrow$ objet j présent sur le plateau dans la pesée i («objet» $m_0 =$ erreur systématique, toujours présent) $\rightarrow \mathbf{M} = \mathbf{R}^\top \mathbf{R} / (N\sigma^2)$

Rq1 : on pourrait considérer m_0 comme un paramètre de nuisance et utiliser la D_s -optimalité

Rq2 : Les éléments de \mathbf{R} prennent **seulement 2 valeurs**, 0 ou 1 \rightarrow problème très particulier, analyse de la variance, etc.

Dans la suite, $\xi \rightarrow$ plutôt des variables quantitatives

$$\text{Ex7: } y^{(i)} = \bar{\theta}_1 \exp(-\bar{\theta}_2 t_i) + \epsilon_i, (\epsilon_i)_i \text{ i.i.d. } \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

2 observations à faire, $\xi_1^2 = (t_1, t_2), 0 \leq t_1 \leq t_2$

$$\rightarrow \mathbf{s}_y(\theta, t) = [\exp(-\theta_2 t), -t\theta_1 \exp(-\theta_2 t)]^\top$$

$$\rightarrow \det \mathbf{M}(\theta, \xi_1^2) = \theta_1^2 (\theta_2^2 - t_1)^2 \exp[-2\theta_2(t_1 + t_2)] / (N^2 \sigma^4)$$

expérience D -optimale $\xi_D = (0, 1/\theta_2)$

ξ_D dépend de $\theta \dots$ et on ne connaît pas θ !

toujours le cas pour modèle NLP !

\dots dans un premier temps, **planification locale** : on travaille à $\theta = \hat{\theta}_0$ fixé (et on espère que $\xi_D(\hat{\theta}_0)$ ne sera pas trop mauvais pour $\bar{\theta}$ inconnu \dots)

4) Planification exacte

Observation $y(i)$ → conditions expérimentales x_i (= point de support $n^o i$)
 $(x_1, \dots, x_N) \rightarrow \xi_N^1$, on va optimiser tous les x_i individuellement

d = dimension du problème (nb. de variables) = $N \times \dim(x_i)$

• Si d pas trop grand, algorithme «classique» (mais \exists contraintes, optimas locaux)

• Si d trop grand → algorithme spécifique

Algorithmes d'échange: à l'itération k , ξ vaut ξ^k , on va **échanger un point** de support x_j par un «meilleur point» x^* (au sens du critère $\Phi(M)$)

$$\xi^k = (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad \updownarrow \quad x^*$$

[Fedorov, 1972]: on considère tous les N échanges possibles, successivement, en repartant chaque fois de ξ^k , puis on effectue le «meilleur» parmi ces $N \rightarrow \xi^{k+1}$

$$\xi^k = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N) \quad \begin{array}{c} \updownarrow \\ \mathbf{x}_1^* \\ \updownarrow \\ \mathbf{x}_j^* \\ \updownarrow \\ \mathbf{x}_N^* \end{array}$$

Une itération $\rightarrow N$ optimisations en dimension $\dim(\mathbf{x}_i)$, puis comparaisons de N valeurs de critère

[Mitchell, 1974]: algorithme «DEFTMAX»

On suppose que l'on peut faire une observation supplémentaire : on optimise par rapport à $\mathbf{x}_{N+1}^* \rightarrow \mathbf{x}_{N+1}^*$

$$\xi_{k+} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{x}_{N+1}^*)$$

puis on revient à N observation en supprimant un point de support : on considère toutes les $N + 1$ suppressions possibles, on choisit la moins pénalisante (pour $\Phi(M)$), soit celle de \mathbf{x}_j

\rightarrow globalement, échange de \mathbf{x}_j par \mathbf{x}_{N+1}^*

[on parle d'excursion de longueur 1, en pratique, on peut utiliser des excursions plus longues...]

Une itération \rightarrow 1 optimisation en dimension $\dim(\mathbf{x}_i)$, puis comparaisons de $N + 1$ valeurs de critère

Itérations plus simples pour DEFTMAX, mais souvent plus d'itérations sont nécessaires

On peut arriver à un blocage :

- DETMAX : le point à supprimer est \mathbf{x}_{N+1}
- Fedorov : pas d'amélioration possible en optimisant un seul \mathbf{x}_i à la fois

5) Planification «approximative»

5.1) Définition

$$M(\theta, \xi_N^1) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_2} s_{\hat{y}_i}(\theta, i) s_{\perp}(\theta, i)$$

Si plusieurs \mathbf{x}_i sont égaux (répétitions de mesures), m valeurs de \mathbf{x}_i différentes, $m > N$,

$$M(\theta, \xi_N^1) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_2} s_{\hat{y}_i}(\theta, \mathbf{x}_i) s_{\perp}(\theta, \mathbf{x}_i),$$

avec $\sum_{i=1}^m \lambda(\mathbf{x}_i) = 1$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \lambda(\mathbf{x}_1) & \dots & \lambda(\mathbf{x}_m) \\ \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_m \end{array} \right\}$$

→ le «protocole expérimental» ξ_N^1 est représenté par :

$$\mathbf{M}(\theta, \xi_N^1) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{s}_{y_i}(\theta) \mathbf{s}_{y_i}^\top(\theta, \mathbf{x}_i) \cdot$$

→ Matrice d'information de Fisher moyenne par observation :

$$\begin{aligned} &= \text{masse } \lambda(\mathbf{x}_i) \text{ affectée à } \mathbf{x}_i \cdot \\ &= \text{«pourcentage d'effort expérimental» en } \mathbf{x}_i \\ &= \text{sous les conditions expérimentales } \mathbf{x}_i \\ &= \frac{N}{r_i} \end{aligned}$$

→ distribution discrète normée sur les \mathbf{x}_i , avec les contraintes $\lambda(\mathbf{x}_i) = \frac{N}{r_i}$

Oublions ces contraintes ...

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_m \\ \lambda_1 & \dots & \lambda_m \end{pmatrix}$$

$$0 \leq \lambda_i, i = 1, \dots, m, \text{ et } \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$$

→ distribution discrète normée sur les \mathbf{x}_i

→ **mesure de probabilité discrète** (points de support \mathbf{x}_i , masses λ_i)

→ «protocole statistique»

on relaxe encore des contraintes → ξ mesure normée quelconque (pas forcément discrète) sur $\mathcal{X} = \{ \mathbf{x} \text{ admissibles} \}$:

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{\sigma^2} \int_{\mathcal{X}} \mathbf{s}_y(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{s}_y^\top(\theta, \mathbf{x}) \xi(d\mathbf{x}),$$

$$\text{avec } \int_{\mathcal{X}} \xi(d\mathbf{x}) = 1$$

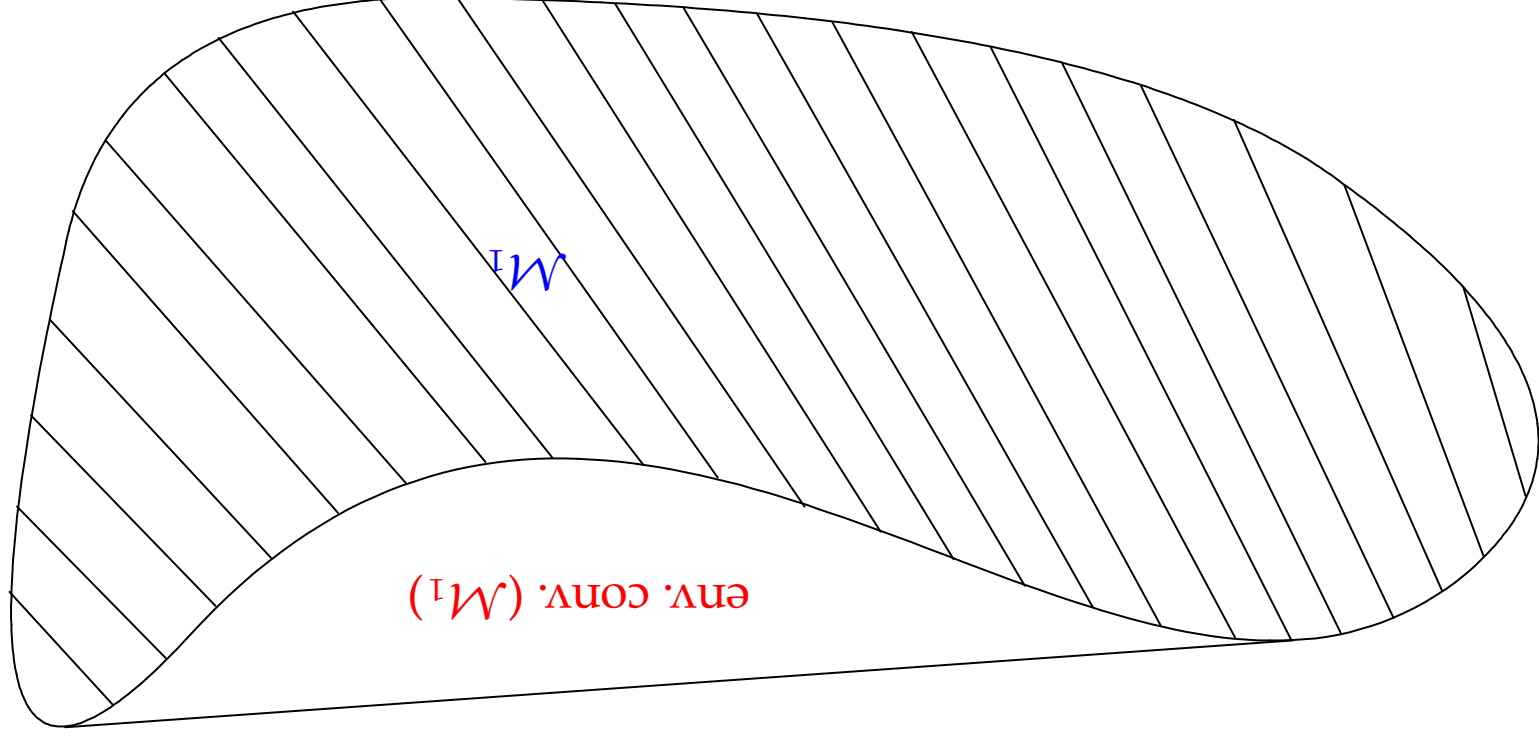
→ «protocole continu» (*continuous design*) [Kiefer, 1959]

$M(\theta, \xi) \in$ enveloppe convexe de l'ensemble M_1 des matrices (de rang 1)

du type

$$\frac{1}{2} s_{y_j}(\theta, \mathbf{x}) s_{y_j}^\top(\theta, \mathbf{x})$$

$M(\theta, \xi)$ est symétrique \in espace vectoriel de dimension $d = \frac{2}{p(d+1)}$, avec $d = \dim(\theta)$



Théorème de Carathéodory :

$M(\theta, \xi)$ peut s'écrire comme combinaison linéaire d'au plus $d + 1$ éléments de M_1 ,

$$M(\theta, \xi) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \lambda_i s_{y_i}(\theta, \mathbf{x}_i) s_{y_i}^\top(\theta, \mathbf{x}_i), \quad m \leq \frac{2}{d(d+1)} + 1$$

$\Rightarrow \xi$ correspond à une mesure discrète avec au plus $\frac{2}{d(d+1)} + 1$ points de support !

vrai en particulier pour le protocole optimal...

On peut même aller plus loin : soit ξ_D D -optimal (maximise $\det M(\theta, \xi)$)

Supposons que $M(\theta, \xi_D) \in \{\text{intérieur[env. conv.}(M_1)]\}$

Alors, $\exists a > 1$ tel que $aM(\theta, \xi_D) \in \text{frontière de } M_1$, et

$$\det aM(\theta, \xi_D) = a^d \det M(\theta, \xi_D) > \det M(\theta, \xi_D)$$

et ξ_D n'est pas D -optimal

$\Rightarrow M(\theta, \xi_D) \in \text{frontière de } M_1$

Théorème de Carathéodory (suite) :
 $M(\theta, \xi_D)$ peut s'écrire comme combinaison linéaire d'au plus d éléments de M_1 , et

$$\xi_D = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_m \\ \lambda_1 & \dots & \lambda_m \end{pmatrix}, \quad m \leq \frac{d(d+1)}{2}$$

Mise en œuvre ?

On sait réaliser un protocole exact avec répétitions de mesure :

$$\lambda_i = \frac{r_i}{N}, \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^m r_i = N.$$

← fixer N et choisir les r_i pour avoir les $\frac{N}{r_i}$ proches des λ_i optimaux
 ← protocole «approximatif»

Rq : On peut parfois réaliser ξ sans approximation, par ex. :
 $\xi =$ densité spectrale de puissance moyenne d'un signal, voir + loin

5.2) Propriétés

• $M(\theta, \xi) \in$ ensemble convexe

• $\forall M_1, M_2 \succeq \mathbf{O}$, avec $M_1 \neq M_2, \forall \alpha, 0 < \alpha < 1$,

$$\log \det[(1 - \alpha)M_1 + \alpha M_2] > (1 - \alpha) \log \det M_1 + \alpha \log \det M_2$$

$\Leftrightarrow \log \det[\cdot]$ fonction concave

ξ_D est D -optimal $\Leftrightarrow \xi_D$ maximise $\log \det M(\theta, \xi)$

Soit $\xi = (1 - \alpha)\xi_D + \alpha\tilde{\xi}$, alors

$$M(\theta, \xi) = (1 - \alpha)M(\theta, \xi_D) + \alpha M(\theta, \tilde{\xi}),$$

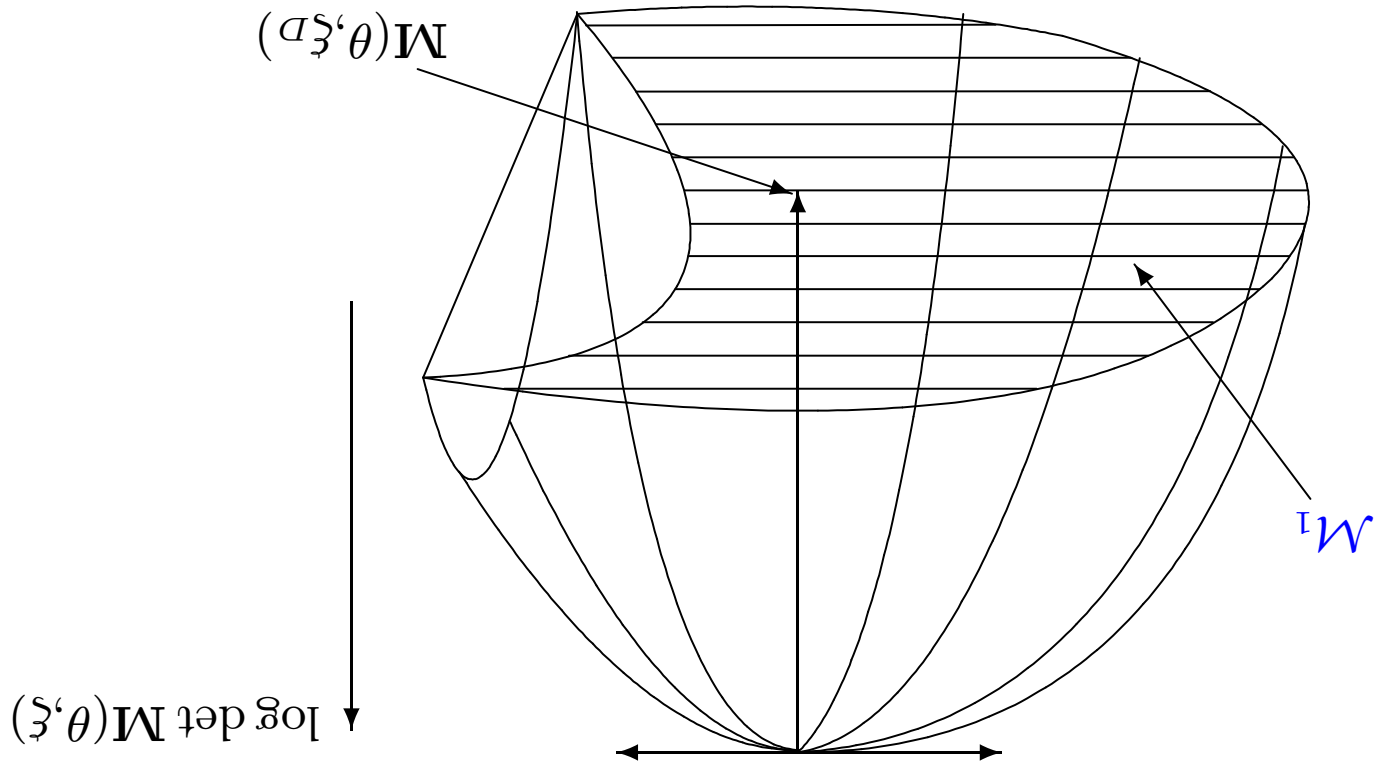
\Leftrightarrow et ξ_D est D -optimal \Leftrightarrow pente ≤ 0 dans toutes les directions,

$$\Leftrightarrow \left. \frac{\partial \alpha}{\partial \log \det M(\theta, \xi)} \right|_{\alpha=0} \leq 0, \forall \tilde{\xi}$$

Que veut dire «on est au sommet» ?

L'ensemble des ξ_D est convexe

Rq : $M(\theta, \xi_D)$ est unique mais pas nécessairement ξ_D



$$\frac{\partial \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\partial \alpha} = \text{trace} \left(\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \frac{\partial \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\partial \alpha} \right)$$

et donc

ξ_D est D -optimal

$$\begin{aligned} &\Leftrightarrow \text{trace} \{ \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) [\mathbf{M}(\theta, \xi) - \mathbf{M}(\theta, \xi_D)] \} \leq 0, \forall \xi \in \tilde{\mathcal{A}} \\ &\Leftrightarrow \text{trace} \{ \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{M}(\theta, \xi) \} \leq p, \forall \xi \in \tilde{\mathcal{A}} \end{aligned}$$

Ceci doit être vrai en particulier pour $\tilde{\xi} = \delta_{\mathbf{x}}$ (masse 1 en \mathbf{x})

$$\text{c'est-à-dire } \mathbf{M}(\theta, \tilde{\xi}) = \frac{\sigma^2}{1} \mathbf{s}_{\mathbf{y}}(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{s}_{\mathbf{y}}^{\top}(\theta, \mathbf{x})$$

→ Condition nécessaire de D -optimalité :

$$\text{trace} \{ \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \frac{\sigma^2}{1} \mathbf{s}_{\mathbf{y}}(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{s}_{\mathbf{y}}^{\top}(\theta, \mathbf{x}) \} = \frac{\sigma^2}{1} \mathbf{s}_{\mathbf{y}}^{\top}(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{s}_{\mathbf{y}}(\theta, \mathbf{x}) \leq p, \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$$

Est-ce suffisant?

Inversement, si

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \frac{1}{\sigma_2} \mathbf{s}_y^\top \mathbf{M}^{-1}(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{s}_y(\theta, \mathbf{x}) \leq d,$$

alors, $\forall \tilde{\xi}$,

$$\mathbf{M}(\theta, \tilde{\xi}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{s}_{y_i}(\theta, \mathbf{x}_i) \mathbf{s}_{y_i}^\top(\theta, \mathbf{x}_i), \text{ avec } \tilde{m} \leq \frac{2}{d(d+1)} + 1,$$

et

$$\text{trace}\{\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{M}(\theta, \tilde{\xi})\} \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i d = d$$

Donc, CNS de D -optimalité:

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, d(\mathbf{x}, \xi_D) = \frac{1}{\sigma_2} \mathbf{s}_y^\top \mathbf{M}^{-1}(\theta, \mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{s}_y(\theta, \mathbf{x}) \leq d$$

et si ξ n'est pas D -optimal, alors $\exists \mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ tel que $d(\mathbf{x}^*, \xi) > d$.

Théorème d'équivalence [Kiefer & Wolfowitz, 1960]:

(1) ξ_D est D -optimal,

(2) $\max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \xi_D) = p$,

(3) ξ_D minimise $\max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \xi_D)$

(1) \Leftrightarrow (2) \Leftrightarrow (3) et de plus

$\forall x_i$ point de support de ξ_D , $d(x_i, \xi_D) = p$

(car $p = \text{trace}\{M^{-1}(\theta, \xi_D)M(\theta, \xi_D)\} = \sum_i \lambda_i d(x_i, \xi_D)$).

Si θ estimé avec le protocole ξ_N^1 , alors

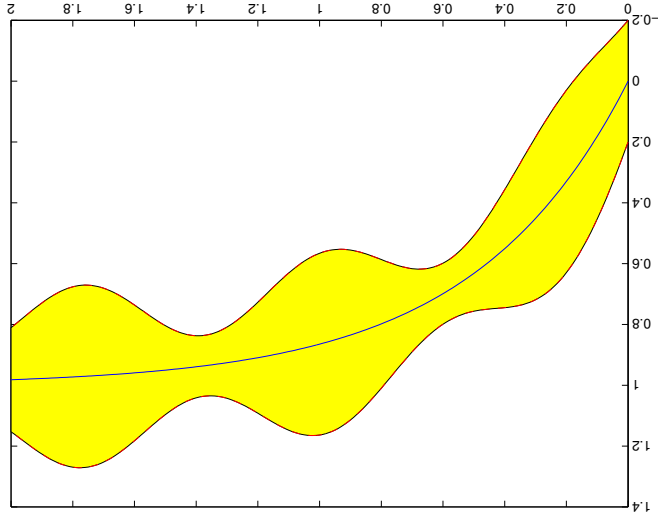
$$\begin{aligned} \text{var}[y_m(\hat{\theta}, \mathbf{x})] &\approx \mathbb{E}\{[y_m(\hat{\theta}, \mathbf{x}) - y_m(\bar{\theta}, \mathbf{x})]^2\} \\ &\approx (1/N) \frac{\partial \theta^\top}{\partial y_m(\theta, \mathbf{x})} |_{\hat{\theta}} \mathbf{M}^{-1}(\hat{\theta}, \xi_N^1) \frac{\partial \theta}{\partial y_m(\theta, \mathbf{x})} |_{\hat{\theta}} \end{aligned}$$

et $\text{var}[y_m(\hat{\theta}, \mathbf{x})]$ proportionnelle à $d(\mathbf{x}, \xi_N^1)$

(3) $\Leftrightarrow \xi_D$ minimise le maximum sur $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ de la variance de la prédiction en \mathbf{x} de la réponse du modèle

D -optimalité $\Leftrightarrow G$ -optimalité

$$y_m(\hat{\theta}, x), y_m(\hat{\theta}, x) \pm 2 \text{ \textit{écart-types}}$$

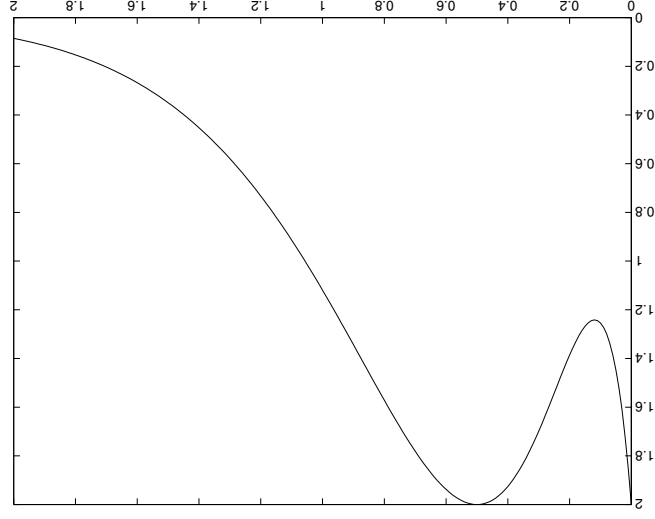


Rq : Où choisir le point suivant pour observer ?

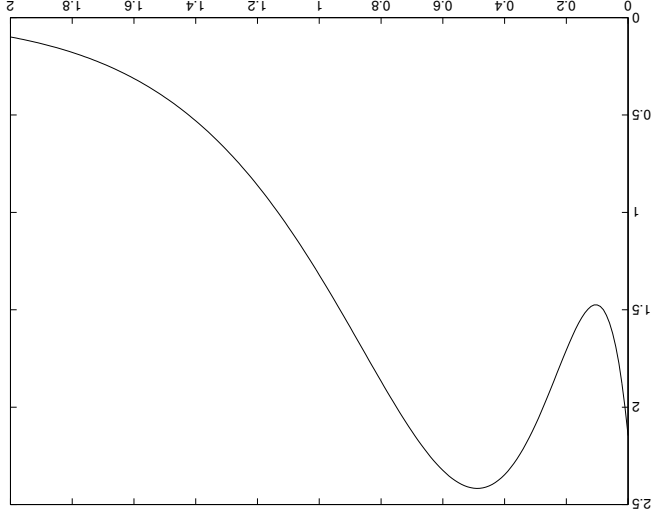
Là où on connaît le moins de chose → là où $d(x, \xi)$ est maximum (voir + loin → algorithmes)

Ex7 (suite) : $y_m(\theta, t) = \theta_1 \exp(-\theta_2 t)$, $\theta_2 = 2$, bruit $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $\mathcal{X} = \mathbb{R}_+$.

$$\xi_D = \begin{cases} 0 & 1/\theta_2 = 0.5 \\ 1/2 & 1/2 \end{cases}, \quad \xi_2 = \begin{cases} 0.01 & 0.75 \\ 1/2 & 1/2 \end{cases}$$



$d(t, \xi_D)$ en fonction de t
(D-optimal)



$d(t, \xi_2)$ en fonction de t
(pas D-optimal)

Propriété de dualité:
Considérons

$$\mathcal{S} = \left\{ \frac{\sigma}{1} \mathbf{s}_y(\theta, \mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathcal{X} \right\}.$$

Alors, l'ellipsoïde de volume minimum, centré en l'origine $\mathbf{0}$ et contenant \mathcal{S} est donné par :

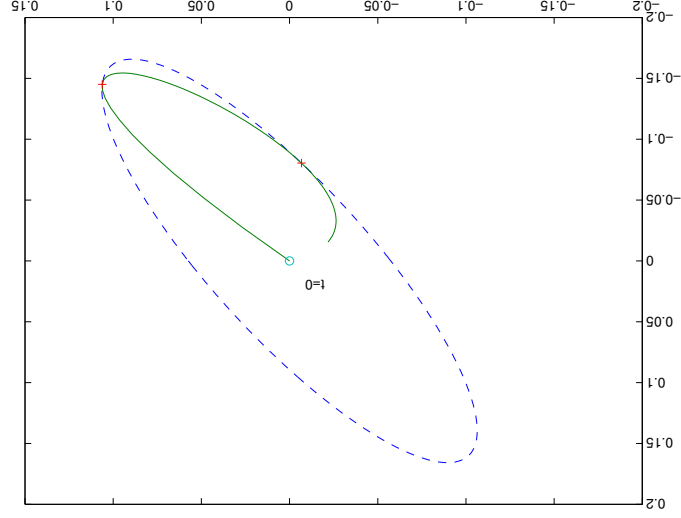
$$\mathcal{E}^* = \{ \mathbf{u} \in \mathbb{R}^p / \mathbf{u}^\top \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi_D) \mathbf{u} \leq p \},$$

avec ξ_D un protocole D -optimal, et les points de contact de \mathcal{E}^* avec \mathcal{S} sont les points de support de ξ_D

Ex8:

$$y_m(\theta, z) = \frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2} [\exp(-\theta_1 z) - \exp(-\theta_2 z)]$$

$\theta_1 = 1, \theta_2 = 5$, bruit $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $\mathcal{X} = \mathbb{R}_+$



S, \mathcal{E}^* , et points de support de ξ_D

Sommes et produits de modèles : [Schwabe, 1996]

Soit $y_m(\theta, \mathbf{x}) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 (x_1)^2 + \theta_4 (x_2)^2$, avec

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad x_1 \in [-1, 1], \quad x_2 \in [-1, 1].$$

$y_m(\theta, \mathbf{x})$ est la somme de

$$y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, x_1) = \theta_0^{(1)} + \theta_1^{(1)} x_1 + \theta_2^{(1)} (x_1)^2$$

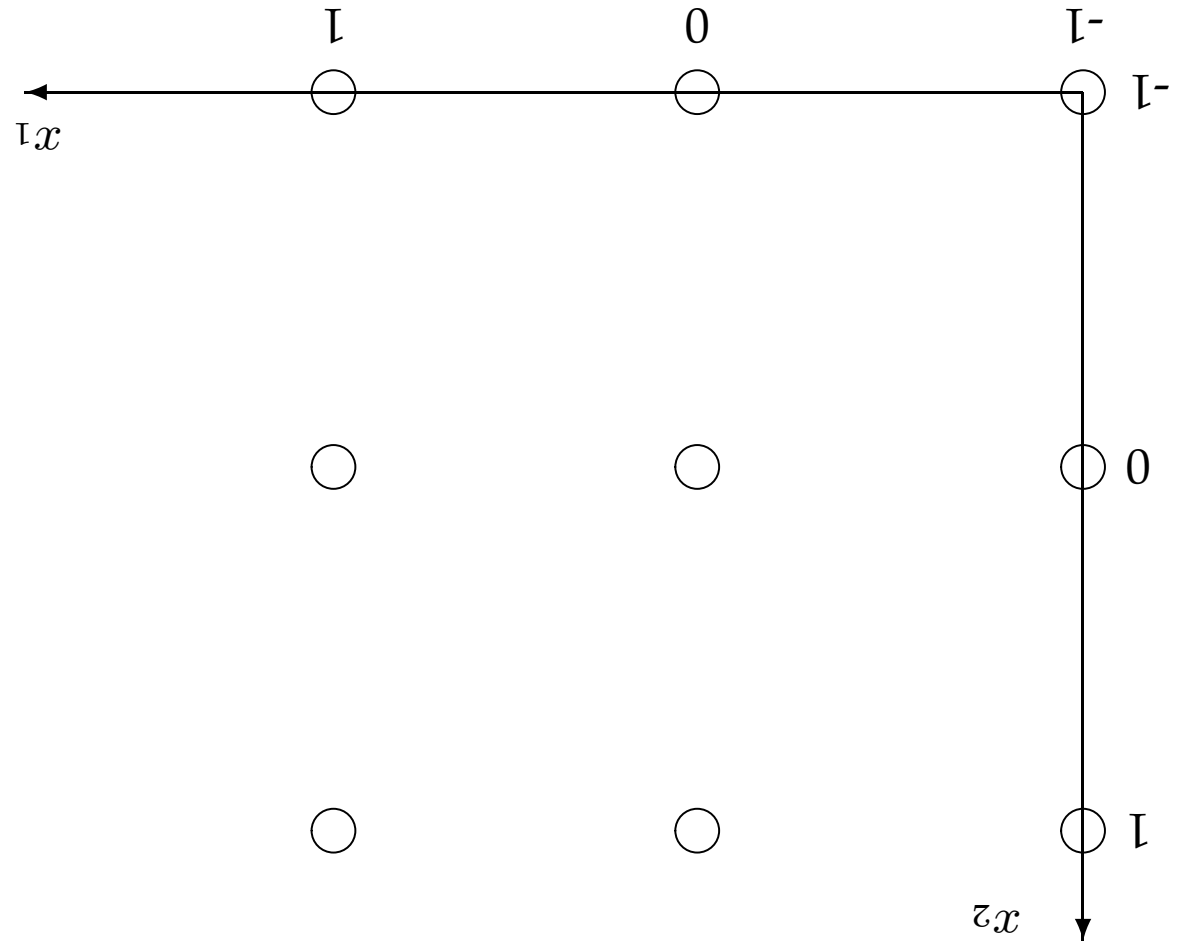
$$\text{et } y_m^{(2)}(\theta^{(2)}, x_2) = \theta_0^{(2)} + \theta_1^{(2)} x_2 + \theta_2^{(2)} (x_2)^2$$

$$\text{Protocole } D\text{-optimal pour } y_m^{(1)} \text{ et } y_m^{(2)} : \xi_1 = \xi_2 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Protocole D -optimal pour y_m ?

← mesure produit $\xi_1 \otimes \xi_2$:

$$\left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1/9 \end{pmatrix} \right\}$$



Aussi D -optimal pour la «structure produit»

$$y'_m(\theta, \mathbf{x}) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 (x_1)^2 + \theta_4 (x_2)^2 + \theta_5 x_1 x_2 + \theta_6 (x_1)^2 x_2 + \theta_7 x_1 (x_2)^2 + \theta_8 (x_1)^2 (x_2)^2$$

Vrai aussi pour la somme de modèles non linéaires [Schwabe, 1995].

Autres critères ?

- Si l'optimum est sur la frontière de l'enveloppe convexe de M_1 , alors $\frac{2}{d(d+1)}$ points de support sont nécessaires
- CNS d'optimalité ? Il faut que le critère ait des propriétés convenables (convexe si min., concave si max.)

Exemple : L-optimalité

→ Minimiser $\text{trace}[\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi)]$, avec $\mathbf{L} \succeq \mathbf{0}$

→ Critère convexe, et

$$\frac{\partial \text{trace}[\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi)]}{\partial \alpha} = -\text{trace} \left[\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \frac{\partial \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\partial \alpha} \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \right].$$

Soit $\xi = (1 - \alpha)\xi_L + \alpha\delta_{\mathbf{x}}$,

Alors ξ_L est L-optimal

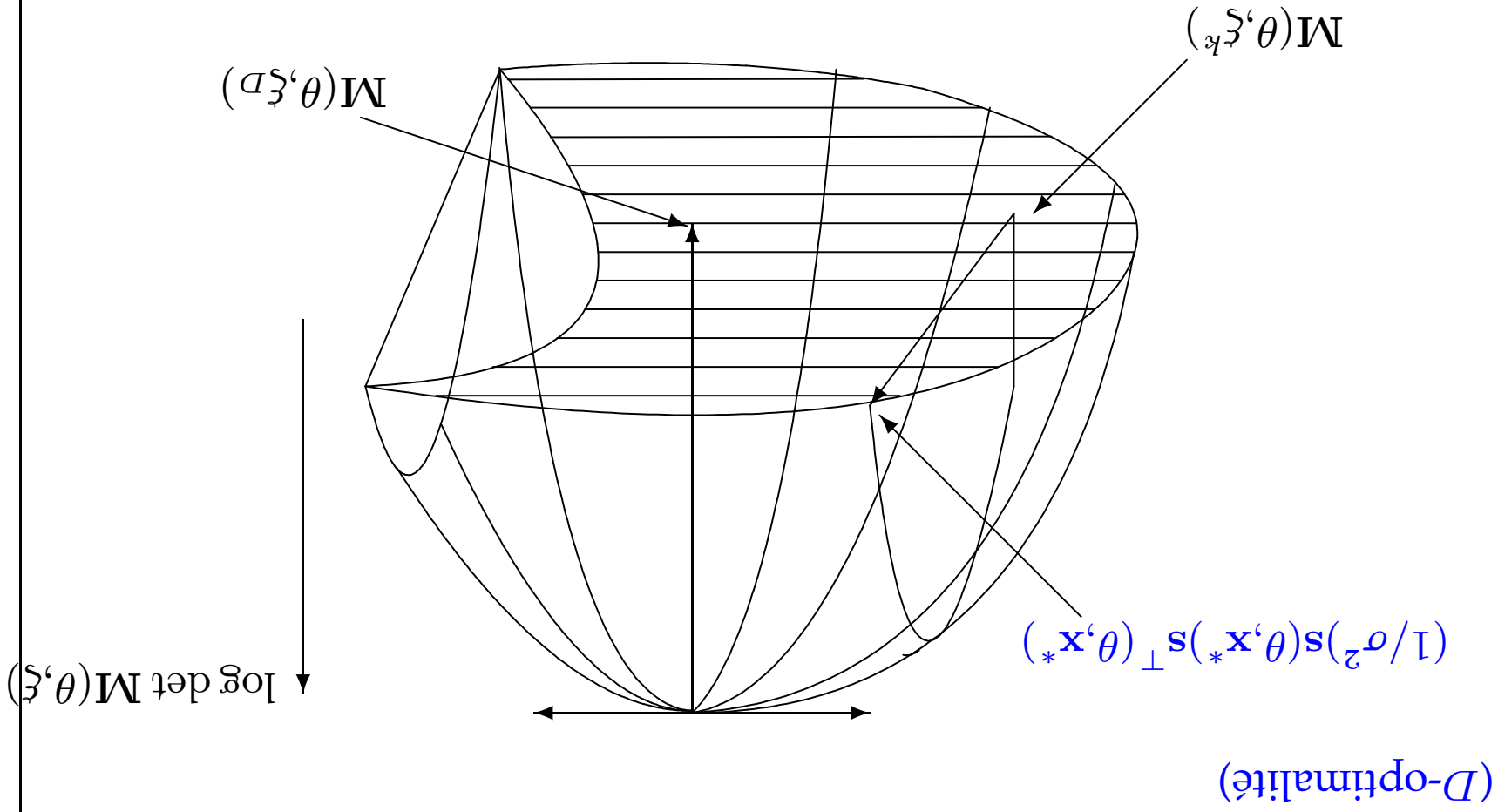
$$\Leftrightarrow \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \frac{\partial \text{trace}[\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi)]}{\partial \alpha} \geq 0,$$

$$\Leftrightarrow \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \frac{1}{\mathbf{s}_\perp^T} \mathbf{s}_\perp^T \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \mathbf{M}(\mathbf{x}, \theta) \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \mathbf{L} \mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi) \mathbf{s}_\perp \geq \mathbf{M}(\mathbf{x}, \theta),$$

$$\leq \text{trace}[\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}(\theta, \xi)].$$

→ autre «théorème d'équivalence»

6) Algorithmes pour planification approximative



Si, à l'itération k , ξ_k n'est pas D -optimal, rechercher la direction de plus grande pente (gradient) :

poser $\xi = (1 - \alpha)\xi_k + \alpha\tilde{\xi}$, et chercher $\tilde{\xi}$ qui maximise

$$\left. \frac{\partial \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0}$$

$\tilde{\xi} = \delta_{\mathbf{x}^*}$ (un seul point de support \mathbf{x}^*), donné par

$$\mathbf{x}^* = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi_k)$$

Algorithme de Fedorov–Wynn :

Pas 1 : Choisir ξ^1 non-dégénère ($\det \mathbf{M}(\theta, \xi^1) \neq 0$), $0 < \delta < 1$, poser $k = 1$

Pas 2 : Calculer $\mathbf{x}_k^* = \arg \max_{x \in X} d(\mathbf{x}, \xi^k)$

Si $d(\mathbf{x}_k^*, \xi^k) > p + \delta$, arrêter (ξ^k est D -optimal à δ près).

Pas 3 : $\xi^{k+1} = (1 - \alpha_k)\xi^k + \alpha_k \delta \mathbf{x}_k^*$

avec $\delta \mathbf{x}_k^*$ distribution ayant un seul point de support \mathbf{x}_k^* , $k \rightarrow k + 1$, retourner au pas 2.

Choix de α_k ?

Fedorov [1972] :

$$\alpha_k = \arg \max_{\theta, \xi^{k+1}} \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi^{k+1}) = \frac{d(\mathbf{x}_k^*, \xi^k) - p}{d(\mathbf{x}_k^*, \xi^k) - [1]}$$

← convergence monotone

Wynn [1970] : α_k satisfait $\alpha_k > 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0$, $\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_k = \infty$

Rq : Si les expériences sont faites séquentiellement

$$M(\theta, \xi_{k+1}^1) = \frac{k}{k+1} M(\theta, \xi_k^1) + \frac{1}{k+1} \frac{\sigma^2}{1} s_y(\theta, \mathbf{x}_k^*) s_y^\top(\theta, \mathbf{x}_k^*)$$

⇔ algorithme de Wynn avec $\alpha_k = \frac{1}{k+1}$

Autres critères → changer la fonction $d(\mathbf{x}, \xi)$

→ Convergence vers $\xi_D, \forall \xi^1$, mais ...

... convergence lente (on ne supprime jamais de points de support de ξ_k)
 Parmi les améliorations possibles :

• Algorithme d'échange :

$$\text{Pas 3'} : \xi_{k+1} = \xi_k + \alpha_k \tilde{\lambda}_k [\delta_{\mathbf{x}_k^*} - \delta_{\tilde{\mathbf{x}}_k}]$$

avec $\tilde{\mathbf{x}}_k = \arg \min_{\mathbf{x}_i \in \text{support de } \xi_k} d(\mathbf{x}_i, \xi_k)$,

$\tilde{\lambda}_k$ la masse de $\tilde{\mathbf{x}}_k$ dans ξ_k , et $\alpha_k = \arg \max_{\alpha \in [0,1]} \log \det M(\theta, \xi_{k+1})$
 Alors, si $\alpha_k = 1$, $\tilde{\mathbf{x}}_k$ est remplacé par \mathbf{x}_k^* qui reçoit la même masse $\tilde{\lambda}_k$

- Optimisation de ξ^k à chaque étape :
 - Pas 3' : Calculer ξ_{k+1}^* par optimisation des masses des points de support donnés par ceux de ξ^k et \mathbf{x}_k^*
 - \Leftrightarrow maximisation d'une fonction concave ($\log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)$) sous des contraintes convexes (masses entre 0 et 1, somme = 1)
 - \leftarrow programmation convexe

Si \mathcal{X} est un ensemble fini [Torsney, 1983, 1988, ...] $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M\}$

Pas 1 : Choisir

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_M \\ \lambda_1^1 & \dots & \lambda_M^1 \end{pmatrix},$$

avec $\lambda_i^1 > 0, i = 1, \dots, M$

Choisir $0 < \delta < 1$, poser $k = 1$

Pas 2 : Si $d(\mathbf{x}_i, \xi_k) > p + \delta, \forall i$, arrêter

Pas 3 :

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k \frac{d}{d(\mathbf{x}_i, \xi_k)}, \quad i = 1, \dots, M$$

$k \leftarrow k + 1$, retourner au pas 2

\leftarrow convergence monotone vers $\xi_D, \forall \xi_1$

Rq : Si $\lambda_i^k = 0$, alors $\lambda_j^i = 0, \forall j > k$

7) Discrimination entre structures de modèles

3 approches : écart de prédiction, entropie, D_s -optimalité

7.1) Écart de prédiction :

2 structures en concurrence, $y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, \mathbf{x})$ et $y_m^{(2)}(\theta^{(2)}, \mathbf{x})$

Supposons les observations obtenues suivant

$$y(\mathbf{x}_i) = y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, \mathbf{x}_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, N$$

Le critère de discrimination (à maximiser) est le paramètre de non-centralité de $y_m^{(2)}$:

$$\Delta_{(1)}^2(\xi_N^{(1)}) = \sum_{i=1}^N [y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, \mathbf{x}_i) - y_m^{(2)}(\hat{\theta}^{(2)}, \mathbf{x}_i)]^2,$$

avec

$$\hat{\theta}^{(2)} = \arg \min_{\theta^{(2)}} \sum_{i=1}^N [y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, \mathbf{x}_i) - y_m^{(2)}(\theta^{(2)}, \mathbf{x}_i)]^2.$$

← protocoles approximatifs :

$$\Delta_2^{(1)}(\xi) = \min_{\theta^{(2)}} \int_{\mathcal{X}} [y_m^{(1)}(\theta_{(1)}^{\bar{}}(\xi), \mathbf{x}) - y_m^{(2)}(\theta_{(2)}^{\wedge}(\xi), \mathbf{x})]_2^2 d\xi(p_{\mathbf{x}}).$$

[Atkinson & Fedorov, 1975] : $\Delta_2^{(1)}(\xi)$ est concave en ξ

Théorème d'équivalence :

ξ^T est T -optimal (maximise $\Delta_2^{(1)}(\xi)$)

$$\Leftrightarrow [y_m^{(1)}(\theta_{(1)}^{\bar{}}(\xi), \mathbf{x}) - y_m^{(2)}(\theta_{(2)}^{\wedge}(\xi), \mathbf{x})]_2^2 \leq \Delta_2^{(1)}(\xi^T), \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$$

De plus, $[y_m^{(1)}(\theta_{(1)}^{\bar{}}(\xi), \mathbf{x}) - y_m^{(2)}(\theta_{(2)}^{\wedge}(\xi), \mathbf{x})]_2^2$ atteint son max. pour \mathbf{x} point de

support de ξ^T

L'ensemble des protocoles T -optimaux est convexe

En pratique : après k observations, estimer les paramètres $\theta_{(1)k}^{\wedge}$ et $\theta_{(2)k}^{\wedge}$ des

2 modèles,

Choisir

$$\mathbf{x}_{k+1} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} [y_m^{(1)}(\theta_{(1)k}^{\wedge}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) - y_m^{(2)}(\theta_{(2)k}^{\wedge}(\mathbf{x}), \mathbf{x})]_2^2,$$

observer $y(\mathbf{x}_{k+1})$ et recommencer...

S'il y a convergence vers un protocole non-dégénéré pour chacun des modèles, il est T -optimal

Extension possible au cas de m structures en concurrence, $m > 2$

7.2) Entropie : m structures en concurrence

$\pi_i(k)$ probabilité que la structure i soit correcte après k observations

Entropie : $h_k^m = - \sum_{i=1}^m \pi_i(k) \log \pi_i(k)$
 (maximale si $\pi_i(k) = \frac{1}{m}$, $i = 1, \dots, m$).

Observation $y(\mathbf{x}_{k+1}) \rightarrow$ variation d'entropie

$$\Delta h_k^m [y(\mathbf{x}_{k+1})] = h_k^m + \sum_{i=1}^m \pi_i(k+1, y, \mathbf{x}_{k+1}) [\log \{\pi_i(k+1, y, \mathbf{x}_{k+1})\} - \pi_i(k)]$$

avec $\pi_i(k+1, y, \mathbf{x}_{k+1}) = \pi_i(k) + 1 = \frac{\sum_{j=1}^m \pi_j(k) \pi_j(k+1, y, \mathbf{x}_{k+1})}{\pi_i(k)}$

où $y_k^1 = y(\mathbf{x}_1, \dots, y(\mathbf{x}_k))$, et $\pi_i(k) [y_k^1 | \mathcal{Y}_k^1] =$ densité de probabilité de y conditionnelle à \mathcal{Y}_k^1 quand le modèle est y_k^m

$\Delta h_m[y(\mathbf{x}_{k+1})]$ dépend de $y(\mathbf{x}_{k+1})$ que l'on ne connaît pas encore...
 → utiliser $E\{\Delta h_m[y(\mathbf{x}_{k+1})]\}$

— approximation numérique de l'espérance dans [Reilly, 1970]

— utilisation d'un majorant dans [Box & Hill, 1967]

7.3) D_s -optimalité :

2 structures en concurrence, par exemple

$$y_m^{(1)}(\theta^{(1)}, x) = \theta_0^{(1)} + \theta_1^{(1)} x \quad \text{et} \quad y_m^{(2)}(\theta^{(2)}, z) = \theta_0^{(2)} + \theta_1^{(2)} x + \theta_2^{(2)} x^2$$

Choisir entre $y_m^{(1)}$ et $y_m^{(2)}$ → estimer $\theta_2^{(2)}$

Critère de planification → critère de précision sur l'estimation de $\theta_2^{(2)}$

Cas de structures non-embouées, extension à m structures, $m > 2$:

[Atkinson & Cox, 1974].

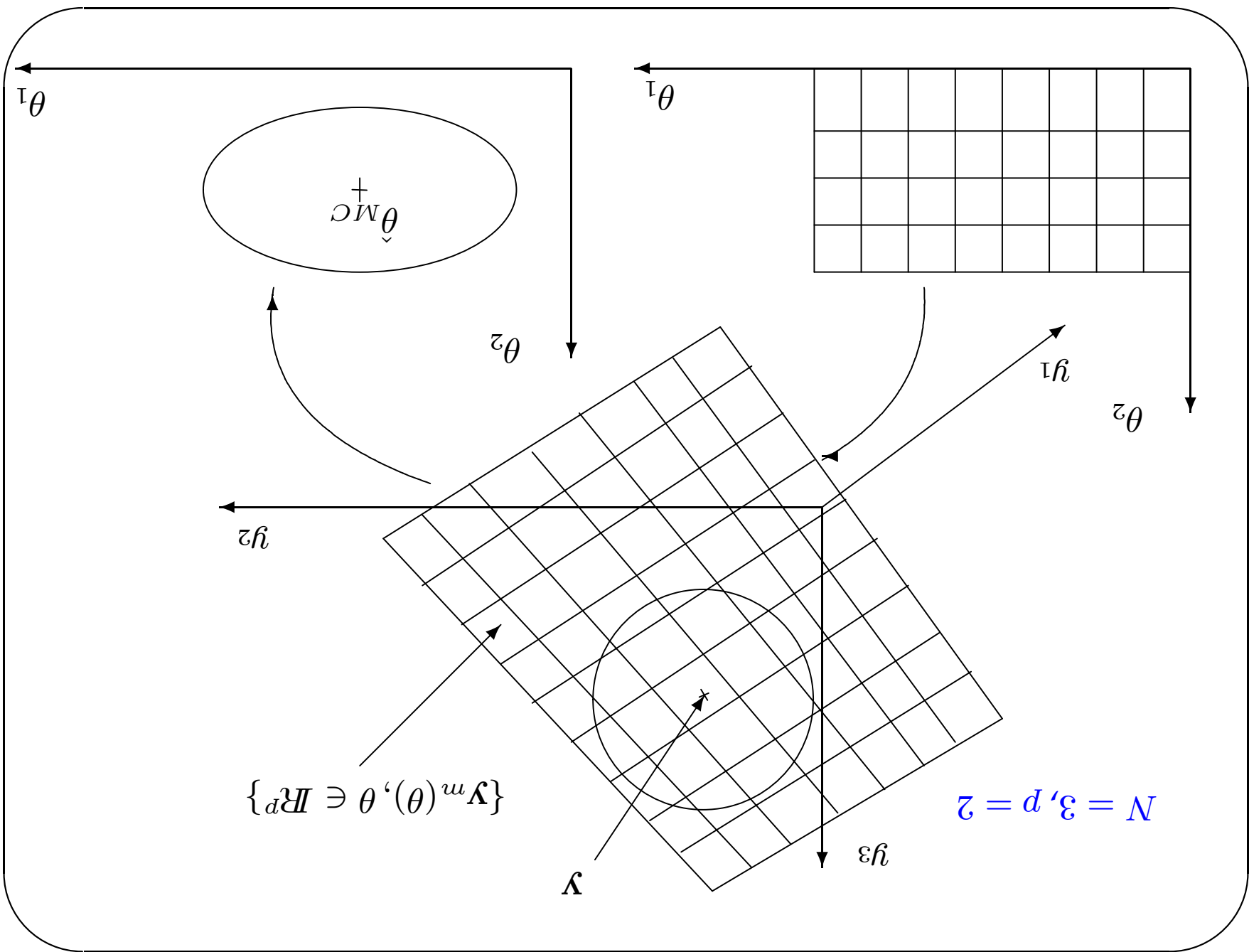
8) Difficultés dues à la non linéarité

8.1) Modèle linéaire par rapport aux paramètres :

Dans l'espace des observations, la surface $S_{y^m} = \{y^m(\theta) / \theta \in \mathbb{R}^p\}$ des réponses de modèles possibles est plane, sa paramétrisation en θ est linéaire

Région de confiance = ellipsoïde

Expérience D -optimale : minimise le volume des régions de confiance
Ne dépend pas de la valeur des paramètres du modèle



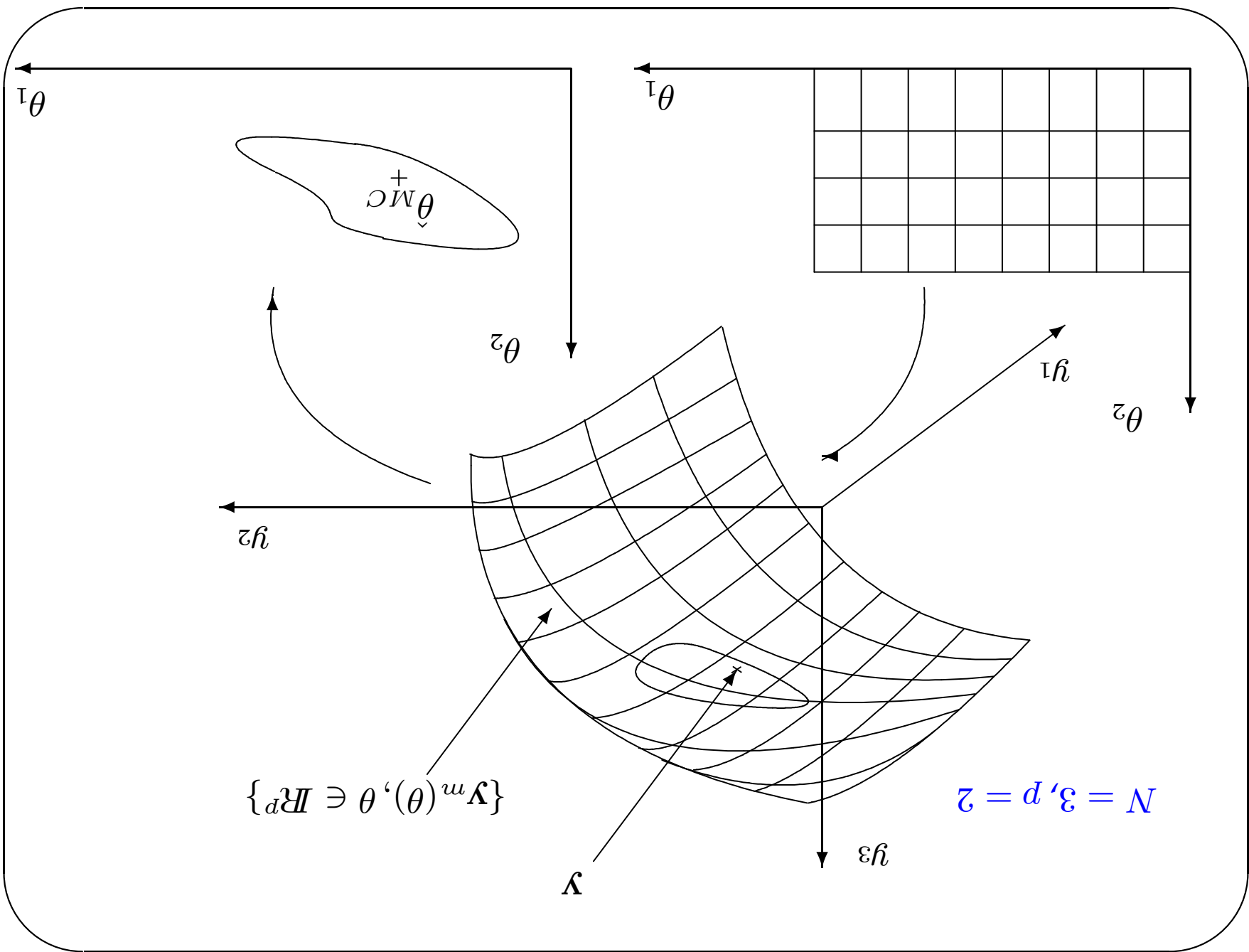
8.2) Modèle non-linéaire par rapport aux paramètres :

Dans l'espace des observations, S_{y^m} est courbe, de paramétrisation en θ non-linéaire

Plusieurs difficultés :

1) Tout est local ! (dépendance en θ inconnu)

2) Tout est approximatif (à cause des courbes)



9) Quelques réponses

9.1) Planification séquentielle

Choisir un critère, D -optimalité par exemple

→ maximiser $\log \det \mathbf{M}(\theta, \xi) \dots$ mais on ne connaît pas θ !

• Planification *totalment* séquentielle :

$\dots \mathbf{x}^k \leftarrow$ observation $y(k) \leftarrow$ estimation $\hat{\theta}^k \leftarrow$ planification $\mathbf{x}^{k+1} \dots$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \log \det \mathbf{M}(\hat{\theta}^k, \xi_{k+1}^1),$$

avec $\xi_{k+1}^1 = \{\xi_k^1, \mathbf{x}\}$

$$\leftarrow \mathbf{x}^{k+1} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{s}_y^\top (\hat{\theta}^k, \mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\hat{\theta}^k, \xi_k^1, \mathbf{s}_y) (\hat{\theta}^k, \mathbf{x})$$

Convergence de $\hat{\theta}$ vers $\bar{\theta}$ et de ξ_k^1 vers $\xi^D(\bar{\theta})$?

→ [Hu, 1998] pour l'estimation bayésienne, pb. difficile pour MC

• Planification séquentielle par blocs :

$$\hat{\theta}^k \leftarrow \xi_{k+1} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\}_{k+1},$$

m observations planifiées : bloc de taille m , $m \geq p$

$$\xi_{k+1} = \arg \max_{\xi} \log \det M(\hat{\theta}^k, \xi),$$

avec $\xi = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\}$

• Approche «classique» [D'Argenio, 1981]:

a) Estimer θ à partir de ces m observations $\rightarrow \hat{\theta}_{k+1}$,

b) Moyenner les estimées précédentes :

$$\hat{\theta}_{k+1} = \frac{1}{k+1} \sum_{j=1}^k \hat{\theta}^j$$

c) Planifier ξ_{k+2} de manière optimale pour $\hat{\theta}_{k+1}$

pas de convergence de $\hat{\theta}^k$ vers $\bar{\theta}$! ($\hat{\theta}^k$ ne forme pas une statistique suffisante)

$\hat{\theta}^k$ converge vers θ_∞ et ξ^k vers $\xi^D(\hat{\theta}_\infty)$, mais $\hat{\theta}^k$ (à partir de m observations) est biaisé, biais $b(\xi^k) = E\{\hat{\theta}^k\} - \theta$ tend vers $b[\xi^D(\hat{\theta}_\infty)] = \hat{\theta}_\infty - \theta$

Solution : estimer $\hat{\theta}^k$ à partir de toutes les observations disponibles. Dans ce cas, $\hat{\theta}^k \rightarrow \theta$

• Même problème si chaque expérience réalisée sur un «individu» différent, de paramètres θ^i , distribués suivant une loi $\pi(\theta)$ dans la population

Approche «classique» : $\hat{\theta}^{k+1} = \frac{1}{k+1} \sum_{j=1}^{k+1} \hat{\theta}^j$, $\hat{\theta}^j =$ paramètres estimés de l'individu $j \rightarrow \hat{\theta}^k$ ne converge pas vers $E_\pi\{\theta\}$, moyenne des paramètres dans la population

Solution : estimer $\pi(\cdot)$ à partir de toutes les observations effectuées (estimation d'une loi de mélange, maximum de vraisemblance \rightarrow [Mallet, 1986])

Après $k + 1$ étapes, $\hat{\pi}^{k+1}(\cdot)$, utiliser $\hat{\theta}^{k+1} = E_{\hat{\pi}^{k+1}}\{\theta\}$, puis $\rightarrow \xi^{k+2}$

9.2) Optimalité en moyenne

Utiliser une loi *a priori* $\pi(\theta)$

$j(\theta, \xi)$ le critère à θ fixé $\rightarrow E_{\theta}\{j(\theta, \xi)\}$

Rq : $\pi(\cdot)$ n'est pas utilisé pour estimer θ

D-optimalité :

$$E_{\theta}\{\det \mathbf{M}(\theta, \xi)\} = j_{ED}(\xi)$$

ED-optimalité, max.

$$E_{\theta}\{\det^{-1} \mathbf{M}(\theta, \xi)\} = j_{EID}(\xi)$$

EID-optimalité, min.

$$E_{\theta}\{\log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)\} = j_{ELD}(\xi)$$

ELD-optimalité, max.

$$E_{\theta}\left\{\left[\frac{\det \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\det \mathbf{M}(\theta, \xi_D)}\right]^{1/p}\right\} = j_{EDeff}(\xi) (\leq 1)$$

ED-efficacité, max.

Quel critère? $\rightarrow j_{ELD}$:

— maximise (une approximation de) la distance de Kullback–Leibler moyenne entre la loi *a priori* et la loi *a posteriori* de θ [Chaloner & Verdine, 1995]

- en pratique, résultats voisins de J_{EDeff} , qui est plus difficile à optimiser,
- est invariant par reparamétrisation.

Reparamétrisation $\theta \mapsto \mu[\theta]$ indépendante de ξ :

$$E_{\theta} \{ \log \det \mathbf{M}(\mu[\theta], \xi) \} = E_{\theta} \{ \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi) \} - 2E_{\theta} \left\{ \log \det \frac{\partial \theta}{\partial \mu} \right\}.$$

Ex7 (suite) : $y_m(\theta, t) = \theta_1 \exp(-\theta_2 t)$, bruit ϵ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

$\theta_1 \sim \pi_1(\cdot)$, $\theta_2 \sim \pi_2(\cdot)$, 2 observations en t_1 et t_2 , $t_2 > t_1 \geq 0$

$$E_{\theta} \{ \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi_1^2) \} = 2E \{ \log \theta_1 \} - 2 \log \sigma^2$$

$$+ 2 \log(t_2 - t_1) - 2E \{ \theta_2 \} (t_1 + t_2)$$

et $\xi_{EILD} = \xi_D(\theta_1, E \{ \theta_2 \})$, $[1/2 \text{ en } 0, 1/2 \text{ en } 1/E \{ \theta_2 \}]$,

(la valeur de θ_1 est sans influence)

→ résultat général : indépendance par rapport aux paramètres linéaires s'ils sont distribués indépendamment des paramètres non-linéaires

Détermination de ξ_{ELD} :

- Loi *a priori* $\pi(\cdot)$ discrète

Remplacer $\log \det M(\theta, \xi)$ par $E_{\theta} \{\log \det M(\theta, \xi)\}$
avec $E\{\cdot\}$ calculé par une somme discrète

Protocole approximatif \rightarrow **Théorème d'équivalence...**

$$E_{\theta} \left\{ \frac{\partial \alpha}{\partial \log \det M(\theta, \xi)} \right\} = \frac{\partial \alpha}{\partial \log \det M(\theta, \xi)}$$

et

$$\xi_{ELD} \text{ est } ELD\text{-optimal} \Leftrightarrow \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} E_{\theta} \{d(\mathbf{x}, \xi_{ELD})\} = p$$

$$\Leftrightarrow \xi_{ELD} \text{ minimise } \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} E_{\theta} \{d(\mathbf{x}, \xi_{ELD})\}$$

\rightarrow mêmes algorithmes que pour planification locale (avec θ fixé)
(mais pas de borne sup. sur le nb. de points de support)

• loi a priori $\pi(\cdot)$ a densité

$$E_{\theta}\{j(\theta, \xi)\} = \int j(\theta, \xi) \pi(d\theta) \rightarrow \text{intégrale multiple}$$

Planification approximative \rightarrow ?

Planification exacte $\xi = \xi_N^1 \rightarrow$ approximation stochastique

Gradient pour maximiser $\log \det M(\theta, \xi)$:

$$\xi^{k+1} = \xi^k + \alpha_k \frac{\partial \xi}{\partial \log \det M(\theta, \xi)} \Big|_{\xi = \xi^k}$$

Gradient pour maximiser $E_{\theta} \{ \log \det M(\theta, \xi) \}$:

$$\xi^{k+1} = \xi^k + \alpha_k \frac{\partial \xi}{\partial E_{\theta} \{ \log \det M(\theta, \xi) \}} \Big|_{\xi = \xi^k}$$

Gradient stochastique : $\xi^{k+1} = \xi^k + \alpha_k \frac{\partial \xi}{\partial \log \det M(\theta, \xi)} \Big|_{\xi = \xi^k, \theta = \theta^k}$

avec θ^k tiré dans la loi $\pi(\cdot)$ et

$$\alpha_k \geq 0, \alpha_k \rightarrow 0, \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k = \infty, \sum_{k=1}^{\infty} (\alpha_k)^2 < \infty$$

\leftarrow pas de valeur moyenne à calculer !

Limitations de l'optimalité en moyenne : on peut avoir de mauvaises performances pour certaines valeurs improbables de θ

9.3) Optimalité au sens minimum

$\theta \in \Theta$ compact, $j(\theta, \xi)$ le critère à maximiser pour θ fixé $\rightarrow \min_{\theta \in \Theta} \{j(\theta, \xi)\}$
D-optimalité :

$$\min_{\theta \in \Theta} \{ \det \mathbf{M}(\theta, \xi) \} = j_{MMD}(\xi) \quad \text{MMD-optimalité, max.}$$

$$\min_{\theta \in \Theta} \left\{ \left[\frac{\det \mathbf{M}(\theta, \xi)}{\det \mathbf{M}(\theta, \xi_D)} \right]^{1/p} \right\} = j_{MMDeff}(\xi) \quad (\leq 1) \quad \text{MMD-efficacité, max.}$$

Ex7 (suite) : $y_m(\theta, t) = \theta_1 \exp(-\theta_2 t)$, bruit ϵ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$
 $\Theta = [\theta_{1M}, \theta_{1m}] \times [\theta_{2m}, \theta_{2M}]$

2 observations en t_1 et t_2 , $t_2 > t_1 \geq 0$

$$\rightarrow \xi_{MMD} = \xi_D(\theta_1, \theta_{2M}),$$

et la valeur de θ_1 est sans influence

\rightarrow résultat général : indépendance par rapport aux paramètres linéaires θ_L

$$\text{si } \Theta = \Theta_L \times \Theta_{NL}$$

Parfois, $\xi_{MMD} = \xi_D(\tilde{\theta})$, avec $\tilde{\theta}$ un θ particulier...

Ex9: $y^m(\theta, x) = \sum_{i=1}^q \theta_{L_i} \exp(-\theta_{NL_i} x)$, bruit ϵ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

et $\Theta_{NL} = \{\theta_{NL} \in \mathbb{R}^q / \theta_{NL_1} \leq b_0, \theta_{NL_{i+1}} \leq \theta_{NL_i} - b_i, i = 1, \dots, q-1\}$.
 $\rightarrow \xi_{MMD} = \xi_D$ (chaque θ_{NL_i} est sur sa borne supérieure), [Melas, 1977]

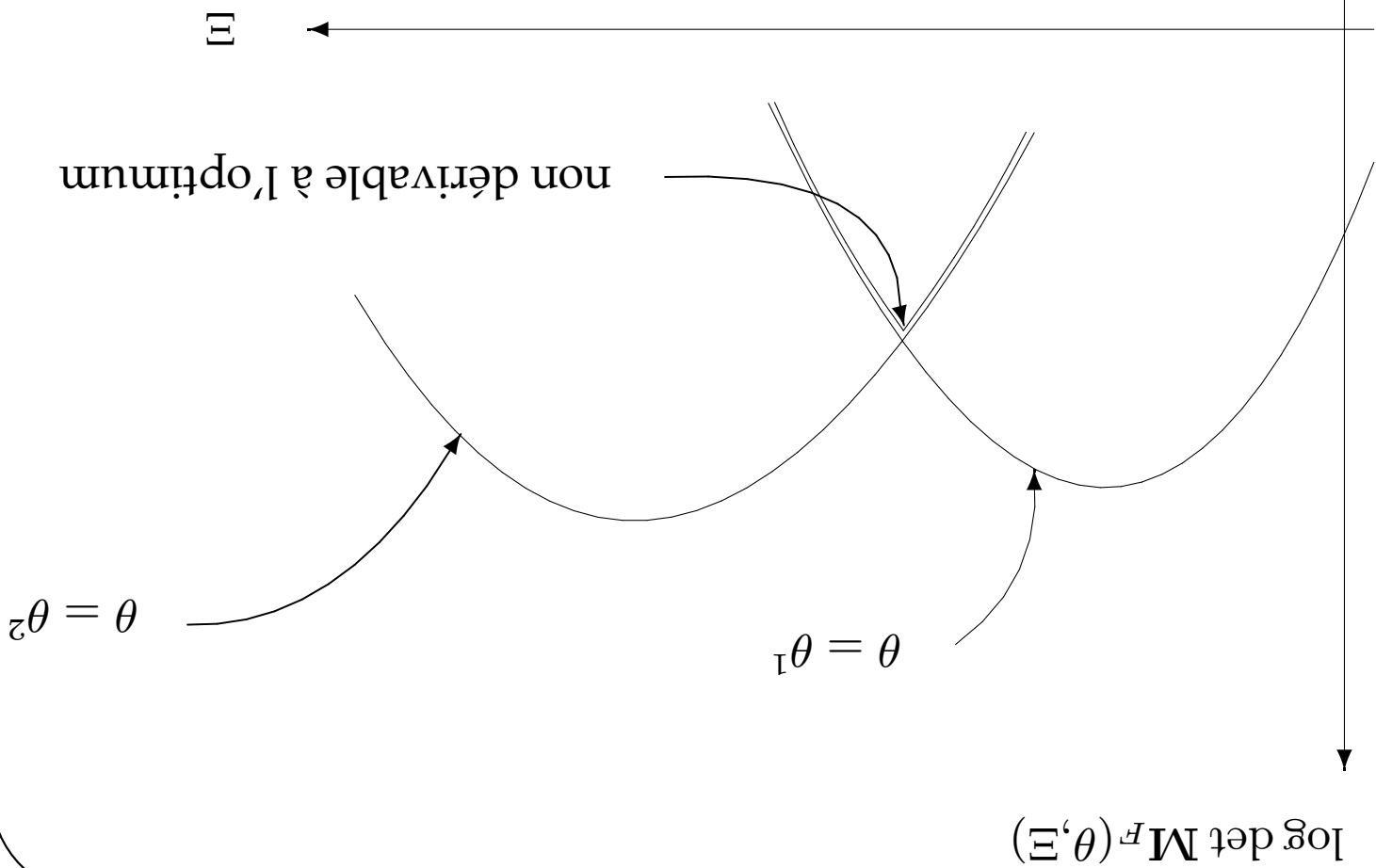
Détermination de ξ_{MMD} :

- Θ est (dénombrable) fini:

$$\Theta = \{\theta_i, i = 1, \dots, M\}$$

Remplacer $\log \det M(\theta, \xi)$ par $\min_i \log \det M(\theta_i, \xi)$ (M valeurs à calculer)

... mais le critère n'est plus dérivable partout



→ détermination de ξ_{MMD} (protocole approximatif) plus difficile que celle de ξ_D !

- Θ est indénombrable (compact de \mathbb{R}^p):

Détermination de ξ_{MMD} approximatif difficile

Protocole exact ξ_N^1 :

→ calculer $\min_{\theta \in \Theta} \{\det M(\theta, \xi)\}$ pour chaque ξ proposé par l'algorithme de maximisation ... trop lourd

→ se ramener au cas Θ dénombrable fini : algorithme de relaxation

Maximiser c par rapport à ξ_N^1 sous les contraintes : $c \leq \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)$, $\forall \theta \in \Theta$.

→ classe \mathcal{R} de valeur « représentatives » de $\theta \in \Theta$:

Pas 1 : choisir

$$\mathcal{R}^{(1)} = \{\theta^1 \in \Theta\}, 0 < \delta < 1$$

poser $k = 1$

Pas 2 : calculer

$$\xi^k = \arg \max_{\xi} \min_{\theta \in \mathcal{R}^{(k)}} \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi)$$

(problème relaxé)

Pas 3 : calculer

$$\theta_{k+1} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi^k)$$

Si $\log \det \mathbf{M}(\theta_{k+1}, \xi^k) \geq \min_{\theta \in \mathcal{R}^{(k)}} \log \det \mathbf{M}(\theta, \xi^k) - \delta$ arrêter,

sinon poser $\mathcal{R}^{(k+1)} = \mathcal{R}^{(k)} \cup \{\theta_{k+1}\}$, $k \leftarrow k + 1$ et retourner au pas 2

9.4) Utilisation de la distribution exacte de $\hat{\theta}$ (compliqué ...)

D-optimalité pour modèle non-linéaire :

- approximer les régions de confiance par des ellipsoïdes
- minimiser le volume de ces ellipsoïdes de confiance

→ linéarisation du modèle

→ utilisation de la loi normale asymptotique $\mathcal{N}(\bar{\theta}, (1/N)\mathbf{M}^{-1}(\bar{\theta}, \xi_N^1))$

[Hamilton & Watts, 1985] → approximation au 2nd ordre du volume de

régions de confiance exactes sur θ , et recherche de l'expérience qui

minimise ce volume approximé

[Pázman, 1984] → distribution non-asymptotique de $\hat{\theta}$ → approximation du point en selle — (erreurs i.i.d. normales $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$)

$$q_{\xi}(\hat{\theta}|\bar{\theta}) = \frac{|\det \mathbf{Q}_{\xi}(\hat{\theta}, \bar{\theta})|}{|\det \mathbf{Q}_{1/2} \det_{1/2} [N\mathbf{M}_N]|} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{P}_{\hat{\theta}}^{\xi} [\mathbf{y}_m(\hat{\theta}, \xi) - \mathbf{y}_m(\bar{\theta}, \xi)]\|_2^2 \right]$$

avec $\mathbf{M}_N = \mathbf{M}(\hat{\theta}, \xi), \xi = \xi_N^1,$

$$\mathbf{y}_m(\theta, \xi) = [y_m(\theta, \mathbf{x}_1), \dots, y_m(\theta, \mathbf{x}_N)]^\top,$$

$$\mathbf{Q}_{\xi}(\hat{\theta}, \xi)_{ij} = [\mathbf{M}_N]_{ij}$$

$$+ \frac{1}{2} [\mathbf{y}_m(\hat{\theta}, \xi) - \mathbf{y}_m(\theta, \xi)]^\top (N\sigma^2 \mathbf{M}_N - \mathbf{P}_{\hat{\theta}}^{\xi}) \frac{\partial^2 \mathbf{y}_m(\theta, \xi)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{\theta=\hat{\theta}}$$

$$\mathbf{P}_{\xi} = \left[\frac{\partial \mathbf{y}_m(\theta, \xi)}{\partial \theta^\top} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{y}_m(\theta, \xi)} \frac{\partial \theta^\top}{\partial \mathbf{y}_m(\theta, \xi)} \right) \right]^{-1}$$

= projecteur sur le plan tangent à \mathcal{S}_{y_m} en $\mathbf{y}_m(\theta, \xi)$

où $\mathcal{S}_{y_m} = \{\mathbf{y}_m(\theta, \xi), \theta \in \Theta\}$ = surface des réponses de modèle

aussi obtenue par [Skovgaard, 1985] et [Hougaard, 1985] dans le cas asymptotique, comme meilleure approximation que la loi normale :

$$p_{\xi}(\hat{\theta} | \theta) = \frac{1}{1} \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}(\hat{\theta} - \theta)^\top [\mathbf{M}_N] (\hat{\theta} - \theta)\right]}{\det[\mathbf{M}_N]^{1/2}}$$

- $q_{\xi}(\bar{\theta}|\theta)$ est exacte si S_{y^m} est plane (expérience avec répétition de $p = \dim(\theta)$ valeurs x_i distinctes)

- «presque exacte» si modèle plat \leftrightarrow tenseur de courbure Riemannienne = 0 (cas particulier : modèles non-linéaires par rapport à un seul paramètre)
- «Presque» \rightarrow on néglige les y à une distance de S_{y^m} supérieure au rayon de courbure de S_{y^m}

Planification d'expériences? ($\xi = \xi_N^I$, planification exacte)

1) Minimiser l'erreur quadratique moyenne

$$j(\xi) = \int_{\Theta} \|\hat{\theta} - \bar{\theta}\|_2^2 q_{\xi}(\hat{\theta}, \bar{\theta}) d(\hat{\theta}), \Theta \text{ fixe}$$

... mais convergence vers une expérience singulière ($\hat{\theta}$ pas estimable) \rightarrow $q_{\xi}(\hat{\theta}, \bar{\theta}) = 0$ sur $\Theta \rightarrow j(\xi) = 0!$

$\hat{\theta}$ à demeurer dans Θ : nouvel estimateur

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \|y - y^m(\theta, \xi)\|_2^2 + w(\theta)$$

avec $w(\theta) \rightarrow \infty$ vers les bords de Θ et $w(\theta) = 0$ ailleurs

→ densité presque exacte de $\theta : \tilde{q}_\xi(\theta, \bar{\theta})$ [Pázman & P, 1992] (contient

l'estimateur du max. *a posteriori* comme cas particulier)

→ minimisation de $\int_{\Theta} \|\tilde{\theta} - \theta\|_2^2 \tilde{q}_\xi(\theta, \bar{\theta}) d\tilde{\theta}$ par approximation stochastique

2) Minimiser l'entropie de la distribution de $\tilde{\theta}$

Approximation normale $p_\xi(\tilde{\theta}|\bar{\theta}) \rightarrow$ entropie

$$\text{ent}(p_\xi) = - \int \log[p_\xi(\tilde{\theta}|\bar{\theta})] p_\xi(\tilde{\theta}|\bar{\theta}) d\tilde{\theta}$$

$$= -\frac{1}{2} \log \det \mathbf{M}(\bar{\theta}, \xi) + \frac{1}{2} \log(2\pi) + \frac{1}{2}$$

→ *D*-optimalité

Remplacer $p_\xi(\tilde{\theta}|\bar{\theta})$ par $q_\xi(\tilde{\theta}|\bar{\theta})$ et approximation au 2nd ordre [P &

Pázman, 1994] ...

$$\text{ent}(q_\xi) = \text{ent}(p_\xi) + \text{termes correctifs} + \mathcal{O}(\sigma^4)$$

3) Utilisation des lois marginales des $\tilde{\theta}_i$ pour comparer des expériences

[Pázman & P, 2001] (voir Ex3)

10) Systèmes dynamiques : entrées optimales

10.1) Entrée paramétrée

Superposition d'entrées de forme simple (échelons, impulsions, polynômes en t , etc.)

Ex10 : $\frac{dy_m}{dt}(\theta, y) = -y_m(\theta, y) + u(t) + y_m(\theta, 0) = 0, y(i) = y_m(\theta, t_i) + \epsilon_i, (\epsilon_i)_i$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

Entrée optimale, surface 1 (= dose unité) dans la famille

$$u(t) = (1 - \alpha)\delta(t) + \frac{T}{\alpha}[H(t) - H(t - T)], T > 0, 0 \leq \alpha \leq 1$$

(α × impulsion en $t = 0$ + créneau d'amplitude α/T de durée T)

On fait une observation, en $t \leq T \leftarrow \xi = (\alpha, T, t)$

$$\left[\left(\frac{T\theta}{1} + 1 \right) \alpha - 1 \right] \exp(-\theta t) + \frac{T\theta}{\alpha} = y_m(\theta, t) \leftarrow$$

$$M(\theta, \xi) = \frac{1}{\sigma^2} \left\{ \exp(-\theta t) \left[\frac{\alpha}{\theta} - t + \alpha t \left(1 + \frac{\theta}{\alpha} \right) \right] - \frac{\theta}{\alpha} \right\}$$

et $\xi_D = (0, T, 1/\theta)$ (T arbitraire) \rightarrow l'impulsion est optimale

Rq1 : Si système linéaire (LI), alors réponse = superposition des réponses aux différentes entrées \rightarrow expression analytique de la réponse

Rq2 : Entrée paramétrée peut servir d'initialisation pour recherche dans une classe + vaste

10.2) Entrée non paramétrée

En général, on simule pour les paramètres $\theta \rightarrow y_m(\theta, t)$, puis simulation des fonctions de sensibilité $\rightarrow M(\theta, \xi) \rightarrow$ calculs assez lourds...

Mais expression analytique de $M(\theta, \xi)$ si modèle LI !

10.2.1) Domaine temporel $\rightarrow \xi = \xi_N^1 = [u(1), \dots, u(N)]$

Ex11 : Structure RIF $y(k) = B(\theta, q)u(k) + \epsilon_k, k = 1, \dots, N, (\epsilon_k)_k$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2),$

$$B(\theta, q) = b_1 q^{-1} + b_2 q^{-2} + \dots + b_n q^{-n}$$

\rightarrow estimer $\theta = (b_1, \dots, b_n)^T$, entrée stationnaire, à puissance P_u bornée :

$$P_u \leq P_{u_{\max}}, \text{ avec } P_u = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u_2^2(k - \tau), \tau = 1, \dots, n$$

$$M(\theta, \xi) = \frac{1}{N\sigma^2} \mathbf{R}^T \mathbf{R}, \text{ avec}$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} u(0) & \dots & u(-1) & \dots & u(N-1) \\ u(1) & \dots & u(0) & \dots & u(N-2) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ u(N-1) & \dots & u(N-2) & \dots & u(N-1) \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \mathbf{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \begin{pmatrix} u^2(k-1) & \dots & u(k-1)u(n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u^2(k-n) & \dots & u^2(k-n) \end{pmatrix}$$

termes diagonaux = $P_u/\sigma^2 \Rightarrow$ déterminant max. pour $\mathbf{M}(\theta, \xi) = P_u \mathbf{I}_p/\sigma^2$
 et entrée optimale $u_D(t)$:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^K u_D(k-i)u_D(k-j) = P_{u_{\max}} \delta_{i,j}, i, j = 1, \dots, n$$

Si $N \rightarrow \infty, u_D(\cdot) \rightarrow$ suite i.i.d.

Si amplitude bornée, $u(k) \in [-1, 1]$, $\mathbf{M}(\theta, \xi_D)$ proportionnelle à $P_u \Rightarrow P_u = P_{u_{\max}}$ et $u_D(k) = \pm 1 \rightarrow$ suite $(-1, +1)$ non corrélée

Rq : Ici modèle LP, et M ne dépend pas de θ

Structure de Box & Jenkins : $y(k) = F(\bar{\theta}, q)u(k) + G(\bar{\theta}, k)e_k$, avec $(e_k)_k$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $F(\theta, q)$ et $G(\theta, q)$ fractions rationnelles en q^{-1} , G stable d'inverse stable

$$\sigma^2 \text{ inconnu} \rightarrow \theta^e = \begin{pmatrix} \theta \\ \sigma^2 \end{pmatrix},$$

on suppose qu'en développant $G(\theta, q) = \sum_{i=0}^{\infty} g_i q^{-i}$, on a $g_0 = 1$ (1er élément de la réponse impulsionnelle = 1)

Max. de vraisemblance \rightarrow erreur de prédiction : $e(\theta, k) = G^{-1}(\theta, q)[y(k) - F(\theta, q)u(k)]$ et

$$\log \pi(y|\theta^e) = -\frac{N}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{k=1}^N e_2^2(\theta, k)$$

$$\text{et } \mathbf{M}(\theta^e, \xi) = \mathbb{E} \left\{ \frac{1}{N} \frac{\partial \log \pi(y|\theta^e)}{\partial \log \pi(y|\theta^e)} \frac{\partial \theta^e}{\partial \theta^e} \right\}$$

$$\leftarrow \frac{\partial \log \pi(y|\theta^e)}{\partial \theta^e} = ?$$

$$\frac{\partial \log \pi(y|\theta^e)}{\partial \theta^e} = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^K e^{\theta^e} s^e(\theta^e, k) - \frac{\partial \sigma^2}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \frac{\partial \theta^e}{\partial \sigma^2} e^{\theta^e} s^e(\theta^e, k)$$

$$\text{avec } s^e(\theta^e, k) = \frac{\partial e(\theta^e, k)}{\partial \theta^e} = \begin{pmatrix} \frac{\partial e(\theta^e, k)}{\partial \theta} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{et } \frac{\partial e(\theta^e, k)}{\partial \theta} = -G^{-1}(\theta, q) \left[\frac{\partial G(\theta, q)}{\partial \theta} e(\theta^e, k) + \frac{\partial F(\theta, q)}{\partial \theta} u(k) \right]$$

[car $G(\theta, q)e(\theta, k) = y(k) - F(\theta, q)u(k)$]

$g_0 = 1 \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial G(\theta, q)} e(\theta, k)$ dépend seulement de $e(\theta, k - \tau), \tau \geq 1$

et donc $\mathbb{E}\{e(\theta, k + \tau) s^e(\theta^e, k) | \theta^e\} = 0, \forall \tau \geq 0$

De plus, $\mathbb{E}\{e(\theta, k + \tau) e(\theta, k) | \theta^e\} = 0, \forall \tau > 0$,

$$\mathbb{E}\{e^2(\theta, k) | \theta^e\} = \sigma^2, \mathbb{E}\{e^3(\theta, k) | \theta^e\} = 0, \mathbb{E}\{e^4(\theta, k) | \theta^e\} = 3\sigma^4$$

et $u(k)$ ne dépend que des $e(\theta, k - \tau), \tau \geq 1$

On reporte :

$$\mathbf{M}(\theta_e, \xi) = \mathbf{E} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \mathbf{s}_e(\theta_e, k) \mathbf{s}_e^\top(\theta_e, k) \middle| \theta_e \right\} + \left\{ \frac{1}{2\sigma_e^4} \frac{\partial \sigma_e^2}{\partial \theta_e} \frac{\partial \sigma_e^2}{\partial \theta_e^\top} \right\}$$

Si σ_e^2 ne dépend pas de θ (bien sûr...)

$$\mathbf{M}(\theta_e, \xi) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}(\theta, \xi) & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \frac{1}{2\sigma_e^4} \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } \mathbf{M}(\theta, \xi) = \mathbf{E} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \frac{\partial e(\theta, k)}{\partial \theta} \frac{\partial e(\theta, k)}{\partial \theta^\top} \middle| \theta \right\}$$

← forme «classique»

σ_e^2 inconnu : sans influence sur l'estimation de θ

Si $u(k)$ obtenu sans *feedback* (donc, boucle ouverte) : $\mathbf{E}\{e(\theta, k)u(k)|\theta\} = 0$ → pas de termes croisés $e \times u$

$$\text{avec } \mathbf{M}^F(\theta, \xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta^F}{\partial F(\theta, q)} n(k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta^F}{\partial F(\theta, q)} n(k) \right]$$

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{M}^G(\theta, \xi) \\ \mathbf{M}^F(\theta, \xi) & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

Si F et G n'ont pas de paramètres en commun, $\theta = \begin{pmatrix} \theta^F \\ \theta^G \end{pmatrix}$

$$\left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta}{\partial G(\theta, q)} e(\theta, k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta^\perp}{\partial G(\theta, q)} e(\theta, k) \right] \mid \theta \right\}^+_{\mathbf{E}}$$

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta}{\partial F(\theta, q)} n(k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta^\perp}{\partial F(\theta, q)} n(k) \right]$$

← pb. de commande optimale ...

$$= \det \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K N \sigma_2^2 \mathbf{v}(k) \mathbf{v}^\top(k) \text{ avec } \mathbf{v}(k) = G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F}{\partial \theta} n(k)$$

$$j_D(n) = \det \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K N \sigma_2^2 \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F}{\partial \theta} n(k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F}{\partial \theta} n(k) \right]$$

ne dépend pas de $n(k)$

$$G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_G}{\partial \theta}$$

← autocorrélation à $\tau = 0$ de l'erreur de prédiction $e(\theta, k)$ filtrée par

$$= \frac{\sigma_2^2}{1} \mathbb{E} \left\{ \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_G}{\partial \theta} e(\theta, k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_G}{\partial \theta} e(\theta, k) \right] \middle| \theta \right\}$$

$$\times \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_G}{\partial \theta} e(\theta, k) \right] \middle| \theta$$

$$\mathbb{E} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K N \sigma_2^2 \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_G}{\partial \theta} e(\theta, k) \right] \right\} = \text{et } M_G(\theta, \xi)$$

Plus facile si

- 1) caractérisation récursive de l'estimation
- 2) commande « temps-réel »

Ex12: Structure ARX, $A(\bar{\theta}_A, q)y(k) = B(\bar{\theta}_B, q)u(k) + \epsilon_k$, $(\epsilon_k)_k$ i.i.d. $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

→ récurrence $y(k) = \mathbf{r}^\top(k)\bar{\theta} + \epsilon_k$

$$\text{avec } \bar{\theta} = \begin{pmatrix} \bar{\theta}_B \\ \bar{\theta}_A \end{pmatrix}, A(\theta_A, q) = \sum_{i=1}^{n_A} a_i q^{-i} \text{ et } B(\theta_B, q) = \sum_{i=1}^{n_B} b_i q^{-i}$$

$$\mathbf{r}^\top(k) = [u(k-1) \ u(k-2) \ \dots \ u(k-n_B) \ -y(k-1) \ \dots \ -y(k-n_A)]$$

Matrice de covariance (MC récurrents), après observation de $y(k+1)$ (et application de $u(k)$):

$$\mathbf{P}^{k+1} = \mathbf{P}^k - \frac{\mathbf{P}^k \mathbf{r}(k+1) \mathbf{r}^\top(k+1) \mathbf{P}^k}{1 + \mathbf{r}^\top(k+1) \mathbf{P}^k \mathbf{r}(k+1)}$$

→ choisir $u(k)$ pour avoir $\det \mathbf{P}^{k+1}$ minimum

facile à mettre en œuvre

Rq : approche optimale à un pas → globalement sous-optimale, mais

$$u_D(k) = \begin{cases} +1 & \text{si } u_*(k) > 0 \\ -1 & \text{si } u_*(k) < 0 \\ \pm 1 & \text{si } u_*(k) = 0 \end{cases}$$

donne $\mathbf{r}^\top(k+1)\mathbf{P}_k\mathbf{r}(k+1) = p_{1,1}(k)u_2^2(k) + 2p_{2,1}^\top(k)\mathbf{r}^{-1}(k+1)u(k) + \mathbf{r}^{-1}(k+1)\mathbf{P}_{2,2}(k)\mathbf{r}^{-1}(k+1) \rightarrow$
 $\mathbf{r}^\top(k+1)\mathbf{P}_k\mathbf{r}(k+1)$ minimum en $u_*(k) = -\frac{p_{2,1}^\top(k)\mathbf{r}^{-1}(k+1)}{p_{2,2}(k)}$ et

$$\mathbf{r}^{-1}(k+1) = [u(k-1) \dots u(k-n_B+1) - y(k) \dots - y(k-n_A+1)]$$

$$\mathbf{P}_k = \begin{pmatrix} p_{1,1}(k) & p_{2,1}^\top(k) \\ p_{2,1}(k) & p_{2,2}(k) \end{pmatrix}$$

→ $\mathbf{r}^\top(k+1)\mathbf{P}_k\mathbf{r}(k+1)$ maximum

$$\det \mathbf{P}_{k+1} = \det \mathbf{P}_k \frac{1 + \mathbf{r}^\top(k+1)\mathbf{P}_k\mathbf{r}(k+1)}{1}$$

10.2.2) Domaine fréquentiel $\leftarrow \xi = ?$

$$\mathbf{M}_F(\theta, \xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K N \sigma_2^2 \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F}{\partial (\theta, q)} u(k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F^\top}{\partial (\theta, q)} u(k) \right]$$

Supposons l'échantillonnage uniforme, à la cadence T :

$$\overline{\mathbf{M}}_F(\theta, \xi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{M}_F(\theta, \xi) / T = \text{matrice d'information de Fisher}$$

moynne **par unité de temps**

$$\mathbf{v}(k) = G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial \theta_F}{\partial (\theta, q)} u(k) \text{ donne}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \mathbf{v}(k) \mathbf{v}^\top(k) = \text{fonction d'autocorrélation de } \mathbf{v}(k) \text{ à } \tau = 0$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/T}^{\pi/T} \mathcal{P}_v(\omega) d\omega = \text{intégrale de la densité}$$

spectrale de puissance moyenne de $\mathbf{v}(k)$

(théorème de Parseval)

et $\mathcal{R}_e(x)$ la partie réelle de x

$$\tilde{\mathbf{M}}_F(\theta, \bar{\omega}) = \frac{1}{\sigma^2} \mathcal{R}_e \left\{ \frac{\partial F(\theta, e^{j\bar{\omega}})}{\partial \theta_F} G^{-1}(\theta, e^{j\bar{\omega}}) G^{-1}(\theta, e^{-j\bar{\omega}}) \frac{\partial F(\theta, e^{-j\bar{\omega}})}{\partial \theta_F^\top} \right\}$$

avec

$$\mathbf{M}_F(\theta, \xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \tilde{\mathbf{M}}_F(\theta, \bar{\omega}) \mathcal{P}_u(\bar{\omega}) d\bar{\omega}$$

$u(k)$ signal réel $\Rightarrow \mathcal{P}_u(\bar{\omega})$ fonction réelle et paire,

avec $\mathcal{P}_u(\bar{\omega})$ la densité spectrale de puissance moyenne du signal $u(k)$

$$\mathbf{M}_F(\theta, \xi) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial F(\theta, e^{j\bar{\omega}})}{\partial \theta_F} G^{-1}(\theta, e^{j\bar{\omega}}) G^{-1}(\theta, e^{-j\bar{\omega}}) \frac{\partial F(\theta, e^{-j\bar{\omega}})}{\partial \theta_F^\top} \mathcal{P}_u(\bar{\omega}) d\bar{\omega}$$

avec $\bar{\omega} = T\omega$. Théorème des interférences \rightarrow

$$\Rightarrow \mathbf{M}_F(\theta, \xi) = \frac{1}{2\pi T\sigma^2} \int_{-\pi/T}^{\pi/T} \mathcal{P}_u(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{P}_u(\bar{\omega}) d\bar{\omega}$$

Considérons des entrées de puissance unité : $\frac{1}{\pi} \int_0^\pi P_u(\bar{\omega}) d\bar{\omega} = 1$

Signal sinusoidal : $u(k) = A \sin(\omega_u k T) = A \sin(k \bar{\omega}_u)$,
 fréquence d'échantillonnage $\nu = \frac{T}{1} \geq 2 \frac{\pi}{2\pi \bar{\omega}_u}$ (Shannon) $\Leftrightarrow \bar{\omega}_u \leq \pi$
 $P_u(\bar{\omega}) = \frac{A^2}{2\pi} [\delta(\bar{\omega} + \bar{\omega}_u) + \delta(\bar{\omega} - \bar{\omega}_u)]$ et $(1/\pi) \int_0^\pi P_u(\bar{\omega}) d\bar{\omega} = \frac{A^2}{2}$

Alors, $\overline{M}_F(\theta, \xi) \in$ enveloppe convexe $\{\overline{M}_F(\theta, \bar{\omega}), \bar{\omega} \in [0, \pi]\}$

$$\Leftrightarrow \overline{M}_F(\theta, \xi) = \sum_{m=1}^{i=1} \tilde{M}_F(\theta, \bar{\omega}_i) \text{ avec } m \leq 1 + \frac{p(p+1)}{2}$$

En fait, on montre même que $m \leq p_F = \dim(\theta_F)$ suffit !

Entrée optimale caractérisée par son spectre de puissance moyenne
 (\Leftrightarrow distribution d'effort expérimental en planification approximative)
 et le spectre optimal est discret, mais réalisé ici sans approximation

$$\mathcal{P}_{u_D} = \left\{ \begin{pmatrix} \bar{\omega}_i \\ \mu_i \end{pmatrix}, i = 1, \dots, m \right\}$$

avec μ_i puissance d'un sinusöide de pulsation (normalisöe) $\bar{\omega}_i$

Rq1 : on peut aussi appliquer m sinusöides de mÖme puissance et de pulsations difförentes $\bar{\omega}_i$, chacune pendant une duröe proportionnelle à μ_i

Rq2 : MÖmes algorithmes que pour la planification approximative

Rq3 : $\bar{\mathbf{M}}^F(\theta, \bar{\omega}_i)$ de rang 2 si $\bar{\omega}_i \neq 0$, de rang 1 sinon $\Leftrightarrow \lfloor p_F/2 \rfloor$ sinusöides suffisent pour estimer θ_F

EX13 : Structure RIF, $F(\theta, q) = B(\theta, q) = b_1 q^{-1} + b_2 q^{-2} + b_3 q^{-3}$, $G(\theta, q) = 1$
 $\theta = \theta_F = (b_1, b_2, b_3)^\top$

$$\tilde{\mathbf{M}}_F(\theta, \underline{\omega}) = \frac{1}{\sigma_2} \mathcal{R}_e \left\{ [e^{-j\omega} \ e^{-2j\omega} \ e^{-3j\omega}]^\top [e^{j\omega} \ e^{2j\omega} \ e^{3j\omega}] \right\}$$

$$= \frac{1}{\sigma_2} \begin{pmatrix} 1 & \cos(\omega) & \cos(2\omega) \\ \cos(\omega) & 1 & \cos(\omega) \\ \cos(2\omega) & \cos(\omega) & 1 \end{pmatrix}$$

et

$$\frac{1}{\sigma_2} \tilde{\mathbf{M}}_F(\theta, \xi) = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_1 & 1 & x_1 \\ x_2 & x_1 & 1 \end{pmatrix}$$

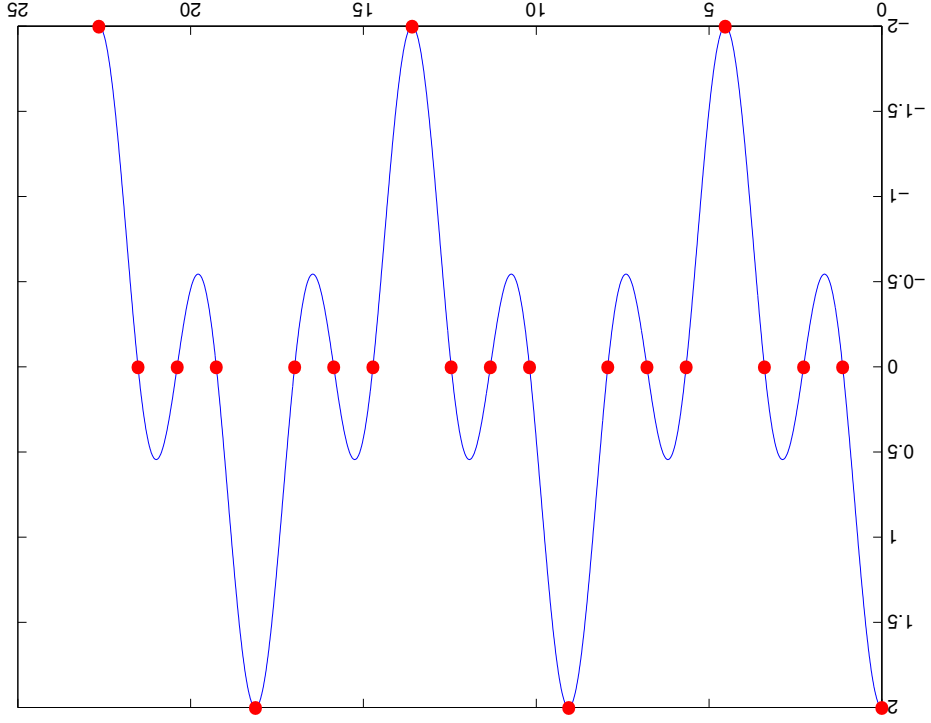
avec $x_1 = \frac{1}{\sigma_2} \int_0^\pi \cos(\omega) \mathcal{P}_n(\omega) d\omega$ et $x_2 = \frac{1}{\sigma_2} \int_0^\pi \cos(2\omega) \mathcal{P}_n(\omega) d\omega$

Entrée D -optimale : $x_1 = x_2 = 0$,

par ex., $\mathcal{P}_n(\omega)$ constant sur $[0, \pi]$ \rightarrow «bruit blanc» (cf. EX11)

... mais entrée optimale pas unique, autre possibilité :

$$u(k) = \cos(k\pi/4) + \cos(3k\pi/4)$$



$$u(t) = \cos[t\pi/(4T)] + \cos[3t\pi/(4T)] \text{ (—) et } u(k) \text{ (•)}$$

EX14: Structure ARX, $A(\theta, q)y(k) = B(\theta, q)u(k) + \epsilon_k$

→ Box & Jenkins, avec $F(\theta, q) = \frac{B(\theta, q)}{A(\theta, q)}$ et $G(\theta, q) = \frac{1}{A(\theta, q)}$

mais $F(\theta, q)$ et $G(\theta, q)$ ont des paramètres en communs !

$$\begin{aligned} \overline{M}(\theta, \xi) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \overline{M}_{\sim}(\theta, \bar{\omega}) \mathcal{P}_n(\bar{\omega}) d\bar{\omega} \\ &+ \frac{1}{T\sigma^2} \mathbb{E} \left\{ \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial G(\theta, q)}{\partial \theta} e(\theta, k) \right] \left[G^{-1}(\theta, q) \frac{\partial G(\theta, q)}{\partial \theta^\top} e(\theta, k) \right] \middle| \theta \right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \overline{M}_{\sim}(\theta, \bar{\omega}) \mathcal{P}_n(\bar{\omega}) d\bar{\omega} \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\pi\sigma^2}{\pi\sigma^2} \left[\frac{\partial G(\theta, e^{j\bar{\omega}})}{\partial \theta} G^{-1}(\theta, e^{j\bar{\omega}}) \right] \left[\frac{\partial G(\theta, e^{-j\bar{\omega}})}{\partial \theta^\top} G^{-1}(\theta, e^{-j\bar{\omega}}) \right] \mathcal{P}_e(\bar{\omega}) d\bar{\omega} \end{aligned}$$

et $\mathcal{P}_e(\bar{\omega}) = \sigma^2$ sur $[0, \pi[$ («bruit blanc»)

Si une seule sinusöide, optimum pour $\bar{\omega}_D = \arccos \left(-\frac{1+a}{2a} \right)$

et

$$\bar{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \begin{pmatrix} \frac{1+a \cos(\omega)}{1+a_2+2a \cos(\omega)} & -b \frac{1+a \cos(\omega)}{1+a_2+2a \cos(\omega)} \\ \frac{1}{b^2} & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{1-a}{1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{P}_n(\bar{\omega}) d\bar{\omega}$$

Pour $A(\theta, q) = 1 + aq^{-1}, B(\theta, q) = bq^{-1}, \theta = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} :$

$$\frac{\partial G(\theta, e^{j\omega})}{\partial \theta} G^{-1}(\theta, e^{j\omega}) = \begin{pmatrix} -\frac{e^{-j\omega}}{1+ae^{-j\omega}} & 0 \\ -\frac{be^{-2j\omega}}{1+ae^{-j\omega}} & e^{-j\omega} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial F(\theta, e^{j\omega})}{\partial \theta} G^{-1}(\theta, e^{j\omega}) = \begin{pmatrix} -\frac{be^{-2j\omega}}{1+ae^{-j\omega}} & e^{-j\omega} \\ -\frac{1+ae^{-j\omega}}{1+ae^{-j\omega}} & e^{-j\omega} \end{pmatrix}$$

Temps continu... : remplacer $q = e^{-j\omega}$ par $s = j\omega$ et π par ∞ dans les

intégrales

Ex15 : $\theta \frac{dy_m(\theta, t)}{dt} + y_m(\theta, t) = u(t)$, $y_m(\theta, 0) = 0$, et $y(t) = y_m(\theta, t) + b(t)$ où le bruit $b(t)$ a une densité spectrale de puissance $\frac{1+a^2\omega^2}{1}$

Partie déterministe : $F(\theta, j\omega) = \frac{1}{1+j\omega\theta}$

Partie stochastique : bruit blanc $\epsilon(t)$ filtré par $G(j\omega) = \frac{1}{1+j\omega a}$

$$\overline{M^F}(\theta, \xi) = \frac{-j\omega}{(1+j\omega\theta)^2} (1+j\omega a)(1-j\omega a) \frac{j\omega}{\omega^2(1+a^2\omega^2)} = \frac{(1+j\omega\theta)^2}{(1+\theta^2\omega^2)^2}$$

Un seul paramètre dans $F \rightarrow$ une sinussoïde suffit pour l'optimalité

Pulsation D -optimale

$$\omega_D = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\theta^2 - 2a^2}} & \text{si } 2a^2 > \theta^2 \\ \infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Rq : Attention, on a toujours supposé le système en boucle ouverte $u(k)$ indépendant des $e(\theta, k)$ (passés)

10.2.2) Entrée & cadence d'échantillonnage optimales

Représentation d'état :

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{b}u(t)$$

$$y(t) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x}(t) + du(t) + b(t)$$

avec $b(t)$ bruit de densité spectrale $\Psi(\omega)$

$\rightarrow b(t)$ = filtrage de $\epsilon(t)$ bruit blanc, par $G(j\omega) = \Psi_{1/2}(\omega)$

Fonction de transfert, partie déterministe : $F(\theta, j\omega) = \mathbf{c}^\top (j\omega \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \mathbf{b} + d$

$$\bar{\mathbf{M}}(\theta, \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial F(\theta, j\omega)}{\partial \theta} \Psi^{-1}(\omega) \frac{\partial F(\theta, -j\omega)}{\partial \theta^\top} \mathcal{P}_u(\omega) d\omega$$

(= matrice d'information de Fisher moyenne par unité de temps)

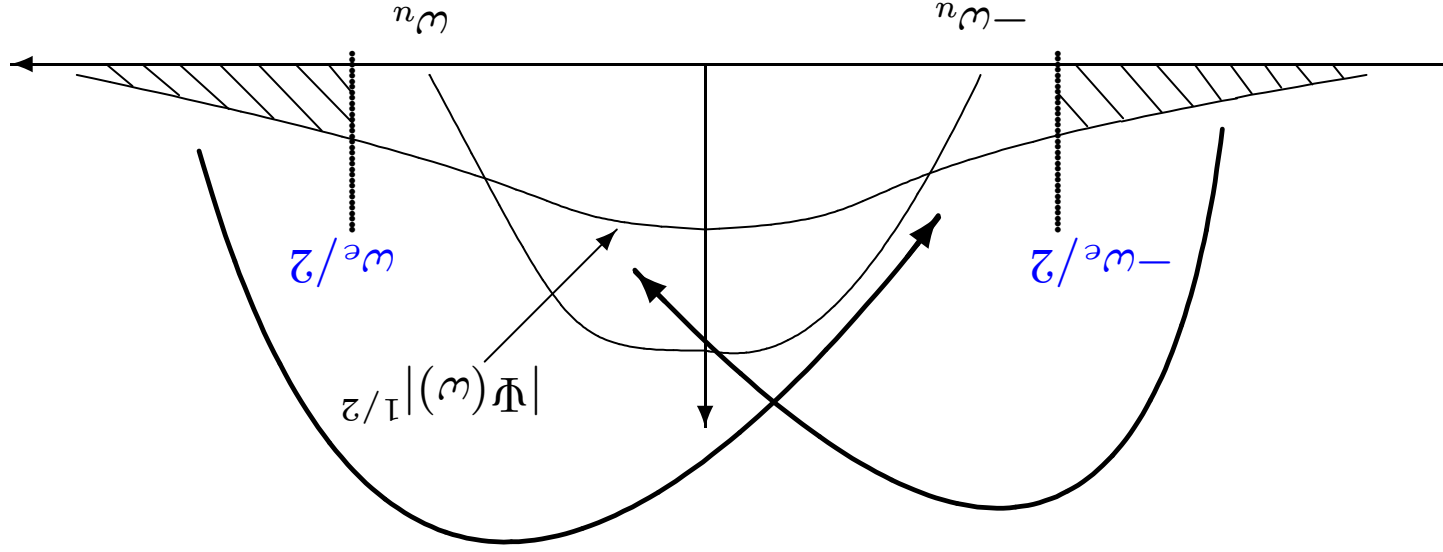
On suppose de nouveau $u(t)$ de puissance unité : $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_u(\omega) d\omega = 1$

Soit $[-\omega_n, \omega_n]$ la largeur de bande du signal $n(t)$:

$$\bar{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\omega_n}^{\omega_n} \frac{\partial F(\theta, j\omega)}{\partial \theta} \Psi^{-1}(\omega) \frac{\partial F(\theta, -j\omega)}{\partial \theta^\top} P_n(\omega) d\omega$$

Sortie échantillonnée à la fréquence $\omega_e/(2\pi)$, avec $\omega_e > 2\omega_n$ (Shannon)

→ pas de détérioration du signal $n(t)$, mais repliement du spectre pour $b(t)$



Densité spectrale du bruit échantillonné :

$$\Psi_e(\omega) = \Psi(\omega) + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi(k\omega_e + \omega) + \Psi(k\omega_e - \omega), \omega \in [-\omega_e/2, \omega_e/2]$$

$\Psi^e(\omega) > \Psi(\omega) \Rightarrow$ après échantillonnage $\bar{M}_e(\theta, \xi) < \bar{M}(\theta, \xi)$

← L'échantillonnage diminue la précision de l'estimation

← filtre pré-échantillonnage $F^e(j\omega)$:

$$F^e(j\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega \notin [-\omega_e/2, \omega_e/2] \\ \text{inversible} & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Densité spectrale du bruit filtré : $\Psi_{F^e}(\omega) = |F^e(j\omega)|^2 \Psi(\omega)$, et pas de repliement du spectre

Matrice d'information de Fisher (moyenne par unité de temps), après filtrage et échantillonnage :

$$\bar{M}_{F^e}(\theta, \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial F(\theta, j\omega)}{\partial \theta} F^e(j\omega) \Psi_{F^e}^{-1}(\omega) F^e(-j\omega) \frac{\partial F(\theta, -j\omega)}{\partial \theta^\top} P_u(\omega) d\omega = \bar{M}(\theta, \xi)$$

échantillonnage à la fréquence $\frac{\omega_e}{2\pi} \rightarrow \frac{\omega}{2\pi}$ échantillons par seconde
 → Matrice d'information de Fisher **moyenne par échantillon** :

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \frac{\omega_e}{2\pi} \overline{\mathbf{M}}(\theta, \xi)$$

«Maximiser $\mathbf{M}(\theta, \xi)$ » $\leftarrow \omega_e$ **minimale** : $\omega_e = 2\omega_n$ (Shannon)

$$\mathbf{M}(\theta, \xi) = \frac{1}{\int_0^{\omega_n} \mathcal{R}_e \left\{ \frac{\partial F(\theta, j\omega)}{\partial \theta} \Psi^{-1}(\omega) \frac{\partial F(\theta, -j\omega)}{\partial \theta^\top} \mathcal{P}_n(\omega) d\omega \right\}}$$

∃ algorithmes pour trouver le spectre optimal pour $n(t)$ [Zarrop, 1979]

Rq : échantillonnage le plus lent possible \Rightarrow à nombre d'observations fixé, expérience de durée la plus grande possible