

Estimation des indices de Shapley pour l'analyse de sensibilité fiabiliste en présence d'entrées dépendantes par échantillonnage préférentiel

Julien DEMANGE-CHRYST, François BACHOC, Jérôme MORIO
ONERA/DTIS - IMT/UPS

29 novembre 2021



Plan

- 1 Contexte
- 2 Analyse de sensibilité basée sur la variance
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

Plan

- 1 Contexte
- 2 Analyse de sensibilité basée sur la variance
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

Contexte

- Code numérique de type boîte noire :

$$\phi : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \longmapsto y = \phi(\mathbf{x}) \end{cases}$$

ϕ coûteux à évaluer \longrightarrow coût d'un algorithme = nombre d'appels à ϕ

Exemples : éléments finis, dynamique des fluides computationnelle, estimation de trajectoire, retombée d'étage d'un lanceur spatial

- Modélisation des incertitudes en entrée :

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^\top \sim \mathcal{L}(f_{\mathbf{X}})$$

- Quantités d'intérêts (QoI) :

- $Y = \phi(\mathbf{X})$
- $\mathbf{1}(Y \geq t)$ avec $t \in \mathbb{R}$ un seuil de défaillance
- Autres...

Plan

- 1 Contexte
- 2 **Analyse de sensibilité basée sur la variance**
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

Analyse de sensibilité basée sur la variance

Question

Quelles sont les entrées de \mathbf{X} qui ont le plus d'influence sur la variance de la quantité $\mathbf{1}(Y \geq t) = \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t)$?

- Décomposition de (Hoeffding, 1948), ANOVA (Sobol, 1993)

$$\text{Indices de Sobol d'ordre 1 : } \forall i \in \llbracket 1, d \rrbracket, TS_i = \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(Y \geq t) | X_i)]}{\mathbb{V}[\mathbf{1}(Y \geq t)]}$$

$$\text{Indices de Sobol d'ordre total : } \forall i \in \llbracket 1, d \rrbracket, TS_i^T = 1 - \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(Y \geq t) | \mathbf{X}_{-i})]}{\mathbb{V}[\mathbf{1}(Y \geq t)]}$$

- Méthodes d'estimation :
 - (Wei, Lu, Hao, Feng, & Wang, 2012) : méthode de Monte-Carlo
 - (Perrin & Defaux, 2019) : estimation non paramétrique

Limites des indices de Sobol fiabilistes

- Indices non adaptés lorsque $p_t = \mathbb{P}(Y \geq t) \ll 1$
 - les indices de Sobol d'ordre 1 peuvent être tous proches de 0
 - difficile de hiérarchiser l'influence des entrées
- Méthodes d'échantillonnage non adaptées
 - (Wei et al., 2012) : problème lorsque $\mathbb{P}(Y \geq t) \ll 1$
 - (Perrin & Defaux, 2019) : fléau de la dimension
- Indices non adaptés dans le cas d'entrées dépendantes
 - les indices de Sobol n'ont plus d'interprétation

Analyse de sensibilité pour des entrées dépendantes

Pour $u = \{i_1, \dots, i_r\} \subseteq \llbracket 1, d \rrbracket$, on note $\mathbf{X}_u := (X_{i_1}, \dots, X_{i_r})$

Indices de Shapley pour l'analyse de sensibilité fiabiliste (Owen, 2014) (Il Idrissi, Chabridon, & Iooss, 2021)

$$TSh_i = \frac{1}{\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t))} \frac{1}{d} \sum_{u \subseteq \{-i\}} \binom{d-1}{|u|}^{-1} (TS_{u \cup \{i\}}^c - TS_u^c)$$

avec $TS_u^c = \mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(Y \geq t) | \mathbf{X}_u)]$ ou $TS_u^c = \mathbb{E}[\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t) | \mathbf{X}_{-u})]$

- Propriétés intéressantes :

- Positivité : $\forall i \in \llbracket 1, d \rrbracket, Sh_i \geq 0$
- Normalisation : $\sum_{i=1}^d Sh_i = 1$

→ les indices de Shapley offrent une grande interprétabilité

Plan

- 1 Contexte
- 2 Analyse de sensibilité basée sur la variance
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

Processus d'estimation des indices de Shapley

$$TSh_i = \frac{1}{\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t))} \frac{1}{d} \sum_{u \subseteq \{-i\}} \binom{d-1}{|u|}^{-1} (TS_{u \cup \{i\}}^c - TS_u^c)$$

avec $TS_u^c = \mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(Y \geq t) | \mathbf{X}_u)]$ ou $TS_u^c = \mathbb{E}[\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t) | \mathbf{X}_{-u})]$.

Deux phases dans le processus d'estimation des indices de Shapley :

- 1 estimation des indices de Sobol clos fiabilistes
- 2 procédure d'agrégation

Deux procédures d'agrégation :

- la procédure des permutations aléatoires (Song, Nelson, & Staum, 2016)
- la procédure des sous-ensembles (Broto, Bachoc, & Depecker, 2020)

Estimation par méthode double Monte-Carlo

- But : estimer $TS_u^c = \mathbb{E} [\mathbb{V}(\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_{-u})]$

Estimateur par double Monte-Carlo (Il Idrissi et al., 2021)

$$\widehat{TS}_{u,MC} = \frac{1}{N_O} \sum_{n=1}^{N_O} \frac{1}{N_I - 1} \sum_{k=1}^{N_I} \left[\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u^{(n,k)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n)}) \geq t) - \overline{\mathbf{1}(\phi, \mathbf{X}_{-u}^{(n)}, t)} \right]^2$$

$$\text{avec } \overline{\mathbf{1}(\phi, \mathbf{X}_{-u}^{(n)}, t)} = \frac{1}{N_I} \sum_{k=1}^{N_I} \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u^{(n,k)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n)}) \geq t)$$

- Estimation de $\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t))$ avec N_v points
- Coût total de d'estimation des d TSh_i : $N_v + (2^d - 2)N_I N_O$

Estimation par méthode Pick-Freeze

- But : estimer $TS_u^c = \mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_u)]$
- Astuce du Pick-Freeze :

$$\mathbb{V}[\mathbb{E}(\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_u)] = \mathbb{E}[\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t)\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}^u) \geq t)] - p_t^2$$

avec $\begin{cases} \mathbf{X} = (\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{-u}) \text{ et } \mathbf{X}^u = (\mathbf{X}_u, \mathbf{X}'_{-u}) \\ \mathbf{X}'_{-u} \sim \mathbf{X}_{-u} | \mathbf{X}_u \text{ et } \mathbf{X}'_{-u} \perp\!\!\!\perp \mathbf{X}_{-u} | \mathbf{X}_u \end{cases}$

Estimateur par Pick-Freeze

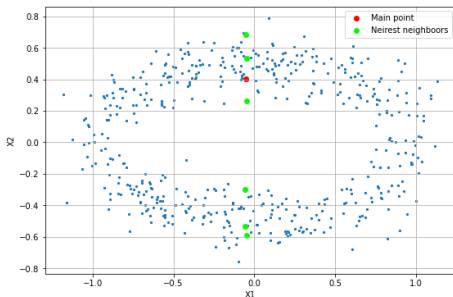
$$\widehat{TS}_{u,PF} = \frac{1}{N_O} \sum_{n=1}^{N_O} \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u^{(n)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n,1)}) \geq t) \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u^{(n)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n,2)}) \geq t) - p_t^2$$

- Estimation de $\mathbb{V}(\mathbf{1}(Y \geq t))$ avec N_v points

- Coût total de d'estimation des d TSh_i : $N_v + 2(2^d - 2)N_O$

Méthodes d'estimation "given data" (Broto et al., 2020)

- Motivations : Réduire le coût d'estimation des Sh_i
- Nécessite seulement un échantillon iid entrées/sorties de la loi de f_X
- Question : Comment générer selon les loi conditionnelles ?
 → Méthode des plus proches voisins



⊕ Estimateurs par double Monte-Carlo et Pick-Freeze given data des Sh_i

- (Il Idrissi et al., 2021) : adaptation au cas fiabiliste
 - ⊕ estimateurs given data des TSh_i
 - ⊖ pas performants lorsque $p_t \ll 1 \implies$ objectif d'amélioration

Problèmes et objectifs

- Inconvénient majeur des estimateurs existants (Il Idrissi et al., 2021) :
 - Estimation peu performante lorsque p_t est très faible

- Objectifs :
 - ① Proposer des estimateurs performants des indices de Shapley fiabilistes lorsque p_t est faible
 - ② Proposer des estimateurs nécessitant peu ou pas d'appels à la fonction ϕ des indices de Shapley fiabilistes après l'estimation de p_t

Piste d'amélioration : échantillonnage préférentiel

- Définition de la probabilité de défaillance :

$$p_t = \mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} [\mathbf{1}(Y \geq t)] = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}(\phi(\mathbf{x}) \geq t) f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

→ on cherche à réduire la variance de l'estimateur Monte-Carlo de p_t

- Introduction d'une densité auxiliaire g :

$$p_t = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}(\phi(\mathbf{x}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbb{E}_g \left[\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X})}{g(\mathbf{X})} \right]$$

→ nouvel estimateur : $\hat{p}_t^{IS} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}^{(n)}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X}^{(n)})}{g(\mathbf{X}^{(n)})}$

avec $(\mathbf{X}^{(n)})_{n \in [1, N]}$ un échantillon iid tiré selon g

Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation des indices de Shapley fiabilistes

Estimation par double Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel

- But : estimer $\mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} [\mathbb{V}_{f_{\mathbf{X}}} (\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_{-u})]$
- Astuce : réécrire la quantité à estimer en éliminant la variance

$$\mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} [\mathbb{V}_{f_{\mathbf{X}}} (\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_{-u})] = p_t - \mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} \left[\mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} (\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_{-u})^2 \right]$$

→ permet l'introduction d'échantillonnage préférentiel

$$\begin{aligned} TS_u^c &= p_t - \mathbb{E}_g \left[\mathbb{E}_g \left(\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}_u | \mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_u)}{g_{\mathbf{X}_u | \mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_u)} \middle| \mathbf{X}_{-u} \right)^2 \frac{f_{\mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_{-u})}{g_{\mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_{-u})} \right] \\ &= p_t - \mathbb{E}_g \left[\mathbb{E}_g \left(\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X})}{g(\mathbf{X})} \middle| \mathbf{X}_{-u} \right)^2 \frac{g_{\mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_{-u})}{f_{\mathbf{X}_{-u}}(\mathbf{X}_{-u})} \right] \end{aligned}$$

→ élimination des densités conditionnelles $f_{\mathbf{X}_u | \mathbf{X}_{-u}}$ et $g_{\mathbf{X}_u | \mathbf{X}_{-u}}$ généralement inconnues en pratique

Estimation par double Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel

Estimateur par double Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel

$$\widehat{TS}_{u,MC}^{IS} = \widehat{p}_{t,N}^{IS} - \left(\widehat{E}_{u,MC}^{IS} - \widehat{E}_{biais,u} \right)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \widehat{E}_{u,MC}^{IS} = \frac{1}{N_O} \sum_{n=1}^{N_O} \left(\widehat{E}_{\mathbf{x}_{-u}^{(n)}}^{IS} \right)^2 \frac{g_{\mathbf{x}_{-u}}(\mathbf{x}_{-u}^{(n)})}{f_{\mathbf{x}_{-u}}(\mathbf{x}_{-u}^{(n)})} \\ \widehat{E}_{\mathbf{x}_{-u}^{(n)}}^{IS} = \frac{1}{N_I} \sum_{k=1}^{N_I} \mathbf{1} \left(\phi(\mathbf{x}_u^{(n,k)}, \mathbf{x}_{-u}^{(n)}) \geq t \right) \frac{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_u^{(n,k)}, \mathbf{x}_{-u}^{(n)})}{g(\mathbf{x}_u^{(n,k)}, \mathbf{x}_{-u}^{(n)})} \end{cases}$$

$$\text{avec } \begin{cases} \left(\mathbf{x}_{-u}^{(n)} \right)_{n \in [1, N_O]} \text{ iid et tiré selon la loi de } g_{\mathbf{x}_{-u}} \\ \left(\mathbf{x}_u^{(n,k)} \right)_{k \in [1, N_I]} \text{ iid et tiré selon la loi de } g_{\mathbf{x}_u | \mathbf{x}_{-u} = \mathbf{x}_{-u}^{(n)}} \end{cases}$$

→ ⊕ Estimateur sans biais, convergent, adapté à $\mathbb{P}(Y > t) \ll 1$

→ ⊕ Méthode immédiatement applicable au cas "given data"

Estimation par Pick-Freeze avec échantillonnage préférentiel

- But : estimer $\mathbb{V}_{f_{\mathbf{X}}} [\mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} (\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) | \mathbf{X}_u)]$
- Écriture de $\mathbb{E}_{f_{\mathbf{X}}} (\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}) \geq t) \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}^u) \geq t))$ avec une densité auxiliaire :

$$\mathbb{E}_g \left(\underbrace{\mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{-u}) \geq t) \mathbf{1}(\phi(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}'_{-u}) \geq t) \frac{f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{-u}) f_{\mathbf{X}}(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}'_{-u}) g_{\mathbf{X}_u}(\mathbf{X}_u)}{g(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{-u}) g(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}'_{-u}) f_{\mathbf{X}_u}(\mathbf{X}_u)}}_{h(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{-u}, \mathbf{X}'_{-u})} \right)$$

Estimateur par Pick-Freeze avec échantillonnage préférentiel

$$\widehat{TS}_{u,PF}^{IS} = \frac{1}{N_O} \sum_{n=1}^{N_O} h(\mathbf{X}_u^{(n)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n,1)}, \mathbf{X}_{-u}^{(n,2)}) - p_t^2$$

- ⊕ Estimateur sans biais, convergent, adapté à $\mathbb{P}(Y > t) \ll 1$
- ⊕ Méthode immédiatement applicable au cas "given data"
- ⊕ Méthode permettant d'étudier l'influence de g

Plan

- 1 Contexte
- 2 Analyse de sensibilité basée sur la variance
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

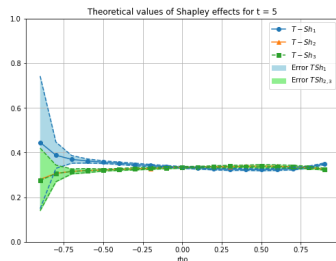
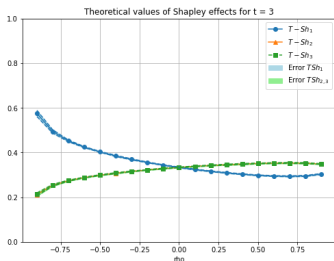
Exemple du cas linéaire gaussien

- Pour $d \geq 2$, $\beta \in \mathbb{R}^d$, fonction linéaire avec entrées gaussiennes :

$$\phi_{\beta} : \begin{cases} \mathbb{R}^d & \longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{x} & \longmapsto y = \beta^{\top} \mathbf{x} \end{cases} \quad \text{avec } \mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$$

- Paramètres utilisés :

$$\beta = (1 \quad 1 \quad 1)^{\top}, \mu = (0 \quad 0 \quad 0)^{\top}, \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho \\ 0 & \rho & 1 \end{pmatrix} \text{ avec } \rho \in]-1, 1[$$



Performances numériques des estimateurs

Cas linéaire gaussien en dimension 3

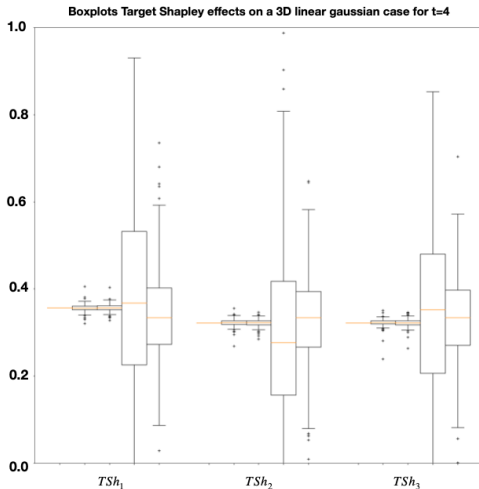


Figure – Pour chaque indice, de gauche à droite :

- Valeur théorique
- double Monte-Carlo avec IS non given data
- Pick-Freeze avec IS given data
- double Monte-Carlo sans IS non given data
- Pick-Freeze sans IS given data

Performances numériques des estimateurs

Cas linéaire gaussien en dimension 7

Boxplots Target Shapley effects on a 7D linear gaussian case for $t=9$

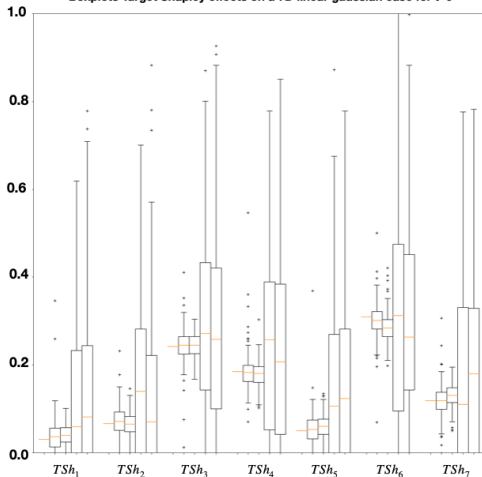


Figure – Pour chaque indice, de gauche à droite :

- Valeur théorique
- double Monte-Carlo avec IS non given data
- Pick-Freeze avec IS given data
- double Monte-Carlo sans IS non given data
- Pick-Freeze sans IS given data

Plan

- 1 Contexte
- 2 Analyse de sensibilité basée sur la variance
 - Indices de Sobol et leurs limites
 - Indices de Shapley
- 3 Estimation des indices de Shapley fiabilistes
 - Méthodes d'estimation existantes
 - Introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation
- 4 Résultats numériques
- 5 Discussion et perspectives

Conclusion

- Résumé des contributions :
 - 1 introduction d'échantillonnage préférentiel dans le processus d'estimation des indices de Sobol clos fiabilistes et donc de Shapley
 - 2 estimateurs given data avec échantillonnage préférentiel ne nécessitant pas d'appels supplémentaires à ϕ après l'estimation de p_t

⇒ réduction de la variance des estimateurs des indices de Shapley fiabilistes quand $p_t \ll 1$

Discussion et perspectives

- Discussion et perspectives :

- 1 Influence du choix de la densité auxiliaire
→ $g_{opt}(\mathbf{x}) \propto \mathbf{1}(\phi(\mathbf{x}) \geq t) f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ pas optimale pour estimer chaque indice de Sobol' clos fiabiliste TS_u^c par Pick-Freeze
- 2 Estimation des indices de Shapley non fiabilistes par échantillonnage préférentiel
→ densité optimale associée à chaque TS_u^c
- 3 Fléau de la dimension
→ méthode des plus proches voisins dégradée par la dimension

Références

- Broto, B., Bachoc, F., & Depecker, M. (2020). Variance reduction for estimation of shapley effects and adaptation to unknown input distribution. SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification, 8(2), 693–716.
- Hoeffding, W. (1948). A Class of Statistics with Asymptotically Normal Distribution. The Annals of Mathematical Statistics, 19(3), 293 – 325.
- Il Idrissi, M., Chabridon, V., & looss, B. (2021). Developments and applications of shapley effects to reliability-oriented sensitivity analysis with correlated inputs. Environmental Modelling & Software, 143, 105115.
- Owen, A. B. (2014). Sobol'indices and shapley value. SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification, 2(1), 245–251.
- Perrin, G., & Defaux, G. (2019). Efficient evaluation of reliability-oriented sensitivity indices. Journal of Scientific Computing, 79(3), 1433–1455.
- Sobol, I. M. (1993). Sensitivity analysis for non-linear mathematical models. Mathematical modelling and computational experiment, 1, 407–414.
- Song, E., Nelson, B. L., & Staum, J. (2016). Shapley effects for global sensitivity analysis : Theory and computation. SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification, 4(1), 1060–1083.
- Wei, P., Lu, Z., Hao, W., Feng, J., & Wang, B. (2012). Efficient sampling methods for global reliability sensitivity analysis. Computer Physics Communications, 183(8), 1728–1743.