Échantillonnage préférentiel et méta-modèles : méthodes bayésiennes optimale et défensive

Julien Bect[1], Roman Sueur[2], Alexis Gérossier[3],
Loïc Mongellaz[3], Sébastien Petit[3] & Emmanuel Vazquez[1]

[1] *Laboratoire des Signaux et Systèmes (L2S, UMR CNRS 8506)*
CentraleSupélec, CNRS, Université Paris-Sud, Gif-sur-Yvette, France
prenom.nom@centralesupelec.fr

[2] *Département de Management des Risques Industriels*
EDF R&D, Chatou, France / prenom.nom@edf.fr

[3] *Majeure Mathématiques Appliquées au Traitement de l'Information et du Signal (MATIS)*
CentraleSupélec, Gif-sur-Yvette, France / prenom.nom@supelec.fr

Résumé. Cet article considère le problème du choix d'une loi instrumentale pour l'estimation par échantillonnage préférentiel d'une intégrale du type $\int h(x)\pi(x)\,\mathrm{d}x$, la fonction h étant coûteuse à évaluer. Pour construire une telle loi instrumentale, nous adoptons une approche bayésienne consistant à introduire un a priori sur h, ce qui permet, étant donnés des résultats d'évaluations de h, de construire une loi instrumentale optimale au sens bayésien. Cette loi instrumentale, bien que permettant de réduire l'espérance (par rapport à la loi a priori) de la variance fréquentiste d'estimation, peut conduire dans certains cas à une variance supérieure à celle de l'estimateur de Monte Carlo. Nous proposons une correction, dite « défensive », de la loi optimale bayésienne pour remédier à ce problème. Une application à l'estimation d'une probabilité de défaillance, à partir d'un code industriel issu du domaine de la fiabilité des structures, illustre l'approche proposée.

Mots-clés. Échantillonnage d'importance, Loi instrumentale, Probabilité de défaillance, Planification d'expériences numériques

Abstract. This paper considers the problem of the choice of an instrumental distribution for the estimation by preferential sampling of an integral $\int h(x)\pi(x)\,\mathrm{d}x$, where the function h is expensive to evaluate. To build such an instrumental distribution, we adopt a Bayesian approach where we introduce a prior about h, which makes it possible to construct a Bayes-optimal instrumental distribution, given evaluation results of h. This instrumental distribution minimizes the expectation (with respect to the prior distribution about h) of the (frequentist) variance of estimation. However, the variance of estimation obtained using this instrumental distribution can be larger than that of the Monte Carlo estimator in some cases. We present a *defensive* correction of the Bayes-optimal instrumental distribution to address this issue. We illustrate the approach on a problem of estimation of a probability of failure, based on an industrial numerical simulator from the domain of structural reliability.

Keywords. Importance sampling, Instrumental distribution, Probability of failure, Design of numerical experiments

1 Échantillonnage préférentiel et méta-modèles

On considère dans cet article le problème de l'estimation par échantillonnage préférentiel d'une intégrale de la forme $\alpha = \int_{\mathbb{X}} h\pi$, avec $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$, π une densité de probabilité (connue) sur $\mathbb{X}$ et $h : \mathbb{X} \to \mathbb{R}_+$ une fonction à valeurs positives, « coûteuse à évaluer ». Étant donnés une densité instrumentale q et un échantillon $(X_i, h(X_i))$ d'évaluations de h, $1 \leq i \leq n$, $X_i \overset{\text{iid}}{\sim} q$, l'estimateur s'écrit (voir par exemple Robert et Casella, 2004)

$$\hat{\alpha}_n^{\text{IS}}(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{h(X_i)\pi(X_i)}{q(X_i)}. \tag{1}$$

Il est sans biais dès lors que le support de q contient celui de π, et sa variance

$$\text{var}\left(\hat{\alpha}_n^{\text{IS}}(h)\right) = \frac{1}{n}\left(\int_{\mathbb{X}} \frac{h^2\pi^2}{q} - \alpha^2\right) = \frac{\alpha^2}{n} \int_{\mathbb{X}} \frac{\left(q - q^*(h)\right)^2}{q} \tag{2}$$

est faible lorsque la loi instrumentale q est proche de la loi optimale $q^*(h) = h\pi/\alpha$.

Supposons un instant qu'une loi instrumentale q a été choisie. La fonction h étant supposée coûteuse à évaluer, une idée naturelle (voir par exemple Swiler et West, 2010) consiste à utiliser le budget n d'évaluations pour construire un méta-modèle (ou modèle approché) $\hat{h}_n$ de h, lequel peut ensuite être utilisé dans une estimation par échantillonnage préférentiel avec une taille d'échantillon $m \gg n$:

$$\hat{\alpha}_m^{\text{IS}}\left(\hat{h}_n\right) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \frac{\hat{h}_n(X_i)\pi(X_i)}{q(X_i)}, \tag{3}$$

qui ne requiert aucune évaluation supplémentaire de h. Cette approche conduit malheureusement à un estimateur qui est en général biaisé.

Il est toutefois possible de tirer partie des propriétés de régularité de h sans perdre la propriété d'estimation sans biais : il suffit, plutôt que de procéder par substitution comme dans l'équation (3), d'utiliser un méta-modèle de h seulement au niveau du choix de la loi instrumentale q dans le cadre d'une procédure en deux étapes : 1) on construit une approximation de h, ou bien directement de $h\pi$, en utilisant un budget de $n_0 < n$ évaluations (éventuellement par planification séquentielle), et on en déduit une loi instrumentale que l'on espère proche de q^* ; 2) on calcule une estimation $\hat{\alpha}_{n_1}^{\text{IS}}(h)$ par échantillonnage préférentiel, avec une taille d'échantillon $n_1 = n - n_0$, en utilisant la densité instrumentale construite à la première étape. L'algorithme NIS fournit un premier exemple d'une telle procédure, dans lequel une estimation non-paramétrique de $h\pi$ est effectuée à l'aide d'un estimateur à noyau (Zhang, 1996) ou d'un « Linear Blend Frequency Polygon » (Neddermeyer, 2009). Plus récemment, des procédures reposant sur une approximation de h elle-même ont été proposées dans un cadre bayésien — avec un a priori de processus gaussien sur la fonction h — par Dubourg (2011), Auffray *et al.* (2012), Dubourg *et al.* (2013) et Bect et Vazquez (2013).

Le reste de l'article s'organise comme suit. Dans la section 2, nous prouvons qu'il existe, dans un cadre bayésien, une façon optimale de choisir la loi instrumentale q sachant le resultat des évaluations effectuées dans la première étape, et proposons une version « défensive » de cette loi optimale visant à maîtriser le risque d'obtenir une variance plus grande que celle de l'estimateur de Monte Carlo simple. Dans la section 3, nous illustrons le propos par une application à un problème de fiabilité (estimation d'une probabilité de défaillance à partir d'un modèle numérique d'un composant passif dans une centrale électrique).

2 Échantillonnage préférentiel bayésien

On s'intéresse dans cette partie à la seconde étape de la procédure décrite dans la section 1, dans le cadre d'une approche bayésienne. On note $\mathbb{P}_0^h$ la loi a priori choisie pour la fonction h, $\mathbb{P}_{n_0}^h$ la loi a posteriori de h à l'issue de la première étape, $\mathbb{P}^q$ la loi des variables $X_1, \ldots, X_{n_1} \overset{\text{iid}}{\sim} q$ générées durant la seconde étape, et $\mathbb{P}_{n_0}^{h,q}$ la loi jointe a posteriori de h, X_1, …, X_{n_1}. Étant donnée une fonction de perte $L : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, il s'agit de déterminer la loi instrumentale *optimale au sens de Bayes*, c'est-à-dire :

$$q^* \left(\mathbb{P}_{n_0}^h \right) = \underset{q}{\operatorname{argmin}} \, \mathbb{E}_{n_0}^{h,q} \left(L \left(\alpha, \hat{\alpha}_{n_1}^{\mathrm{IS}}(h) \right) \right), \tag{4}$$

la minimisation portant sur la densité de probabilité q utilisée dans l'estimateur $\hat{\alpha}_{n_1}^{\mathrm{IS}}(h)$. Dans le cas particulier d'une fonction de perte quadratique, la densité optimale est donnée par le résultat suivant [1].

Proposition 1. *Soit $L : (a, b) \mapsto (a - b)^2$ la fonction de perte quadratique. Supposons que h admet sous $\mathbb{P}_{n_0}^h$ des moments d'ordre 2 et posons $g_{n_0}(x) = \sqrt{\mathbb{E}_{n_0}^h \left(h(x)^2 \right)}$. Alors le minimum*

$$\min_q \mathbb{E}_{n_0}^{h,q} \left(L \left(\alpha, \hat{\alpha}_{n_1}^{IS}(h) \right) \right) = \frac{1}{n_1} \left(\left(\int_{\mathbb{X}} g_{n_0} \, \pi \right)^2 - \mathbb{E}_{n_0}^h \left(\alpha^2 \right) \right) \tag{5}$$

est atteint par la densité

$$q^* \left(\mathbb{P}_{n_0}^h \right) = \underset{q}{\operatorname{argmin}} \, \mathbb{E}_{n_0}^{h,q} \left(\operatorname{var} \left(\hat{\alpha}_{n_1}^{IS}(h) \right) \right) \propto g_{n_0} \, \pi. \tag{6}$$

Démonstration. En conditionnant par h et en utilisant l'équation (2) pour l'expression de la variance, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{n_0}^{h,q} \left(\left(\hat{\alpha}_{n_1}^{\mathrm{IS}}(h) - \alpha \right)^2 \right) &= \mathbb{E}_{n_0}^h \left\{ \mathbb{E}_{n_0}^q \left(\left(\hat{\alpha}_{n_1}^{\mathrm{IS}}(h) - \alpha \right)^2 \right) \right\} \\ &= \mathbb{E}_{n_0}^h \left\{ \frac{1}{n_1} \left(\int_{\mathbb{X}} \frac{h^2 \pi^2}{q} - \alpha^2 \right) \right\} = \frac{1}{n_1} \left(\int_{\mathbb{X}} \frac{g_{n_0}^2 \pi^2}{q} - \mathbb{E}_{n_0}^h \left(\alpha^2 \right) \right). \end{aligned}$$

1. Résultat déjà annoncé dans une précédente communication (Bect et Vazquez, 2013) sans actes

La loi instrumentale q intervient seulement dans le premier terme. On peut le minorer par l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\int_{\mathbb{X}} \frac{g_{n_0}^2 \pi^2}{q} = \int_{\mathbb{X}} \left(\frac{g_{n_0}\pi}{q}\right)^2 q \geq \left(\int_{\mathbb{X}} \frac{g_{n_0}\pi}{q}\, q\right)^2 = \left(\int_{\mathbb{X}} g_{n_0}\pi\right)^2, \tag{7}$$

et il suffit pour conclure d'observer que la borne inférieure est atteinte par la densité instrumentale $q^*\left(\mathbb{P}_{n_0}^h\right)$. □

La loi instrumentale optimale fournie par la proposition 1, que l'on notera simplement $q_{n_0}^*$ dans la suite, n'est connue qu'à une constante multiplicative près. La fonction $g_{n_0}\,\pi$ n'étant pas coûteuse à évaluer (comparativement à h) on supposera qu'on peut, tout comme Auffray *et al.* (2012) et Dubourg *et al.* (2013), obtenir par Monte Carlo une estimation $\hat{Z}_m$ de cette constante $Z = \int_{\mathbb{X}} g_{n_0}\,\pi$ suffisamment précise (m grand) pour ne pas détériorer significativement la variance de l'estimateur. L'estimateur résultant s'écrit :

$$\hat{\alpha}_{n_0,n_1}^{\mathrm{BIS}} = \hat{Z}_m \cdot \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \frac{h\left(X_i\right)}{g_{n_0}\left(X_i\right)}, \tag{8}$$

et il reste sans biais puisque $\hat{Z}_m$ est un estimateur sans biais de Z, indépendant des X_i.

L'espérance de la variance, pour un estimateur utilisant la loi instrumentale optimale, est donnée par l'équation (5) ; elle toujours plus petite, en particulier, que l'espérance de la variance de l'estimateur de Monte Carlo simple, c'est-à-dire utilisant la loi instrumentale $q = \pi$. Rien n'empêche, en revanche, la variance *réalisée* dans la seconde étape (donnée par l'équation (2) avec $q = q_{n_0}^*$) d'être plus grande que la variance de l'estimateur de Monte Carlo simple, voire infinie. Cela se produit si $q_{n_0}^*$ sous-estime trop fortement la densité optimale $q^*(h)$ sur certaines parties de $\mathbb{X}$. Un éventail de techniques permettant de contrôler ce problème est passé en revue par Owen et Zhou (2000). Nous proposons d'utiliser la technique du « mélange défensif » d'Hesterberg (1995) en combinaison avec la proposition 1. Concrètement, cela revient à utiliser une densité de la forme

$$q_{n_0,\varepsilon}^* = \frac{\left(g_{n_0} + \varepsilon\right)\,\pi}{Z + \varepsilon}, \tag{9}$$

avec $\varepsilon > 0$ un paramètre à choisir. Cette densité peut être vue comme un mélange de la densité optimale $q_{n_0}^*$ et de la densité d'origine π, avec comme poids respectifs $Z/(Z+\varepsilon)$ et $c_\varepsilon = \varepsilon/(Z+\varepsilon)$. La variance de l'estimateur est alors finie, et égale au plus à la variance de l'estimateur de Monte Carlo simple multipliée par $1/c_\varepsilon$.

3 Application à un problème de fiabilité

Nous appliquons l'approche décrite ci-dessus à un problème industriel concernant l'évaluation de la probabilité de défaillance d'un composant passif d'une centrale électrique en

Variable aléatoire	Loi	Paramètres
Épaisseur du revêtement (mm)	uniforme	$a = 7.5$, $b = 9$
Hauteur du défaut (mm)	Weibull	$\sigma = 3.09$, $\kappa = 1.8$ (shape)
Ratio hauteur/longueur	lognormale	$\mu_{\log} = -1.516$, $\sigma_{\log} = 0.504$
Vieillissement du matériau	gaussienne	$\mu = 0$, $\sigma = 1$
Résistance du matériau	gaussienne	$\mu = 0$, $\sigma = 1$

TABLE 1 – Variables d'entrée du modèle de composant passif considéré à la section 3. Ces variables, probabilisées, sont supposées indépendantes.

présence d'un défaut. Un code thermo-mécanique permet à EDF de modéliser le comportement du composant face à un chargement. Ce comportement est décrit à l'aide d'une grandeur scalaire y, qui dépend de $d = 5$ paramètres $x_1, \ldots, x_5$ dont les lois marginales π_j ($1 \leq j \leq d$) sont précisées par le tableau 1. On note $f : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$, $x \mapsto y = f(x)$, la fonction représentant le code de calcul thermo-mécanique ($\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$).

Une défaillance survient lorsque y descend en-dessous d'un seuil y_{crit} et on s'intéresse à la probabilité de défaillance $\alpha = \int_{\mathbb{X}} h\,\pi$ avec $h(x) = \mathbb{1}_{f(x) \leq y_{\text{crit}}}$ et $\pi(x) = \prod_{j=1}^{d} \pi_j(x_j)$. Une évaluation de f prend quelques secondes et, dans cette étude, le seuil y_{crit} a été choisi de façon à avoir $\alpha \approx 10^{-3}$. Sur un échantillon de référence de taille $m = 10^5$, on a $\hat{\alpha}_m^{\text{MC}} = 3.42\,10^{-3}$ avec un coefficient de variation d'environ 5%.

Un plan d'expérience « space-filling » [2] de taille $n_0 = 100$ est utilisé pour la première étape. On considère deux variantes notées A et B d'un a priori de processus gaussien sur f avec une moyenne constante et une covariance de Matérn de regularité 5/2 : pour le modèle A les paramètres ont été obtenus par maximisation de la vraisemblance restreinte ; le modèle B est identique à l'exception de son second paramètre de portée, modifié « manuellement » pour les besoins de la démonstration. Pour chacun des deux modèles, la moyenne a posteriori — à l'issue de la première étape — de $\hat{\alpha}_m^{\text{MC}}$ est raisonnablement proche de la valeur vraie ($5.29\,10^{-3}$ pour A et $3.95\,10^{-3}$ pour B) avec une proportion similaire de points « mal classés » [3] dans l'échantillon de référence ($1.75\,10^{-3}$ pour A et $0.86\,10^{-3}$ pour B) ; le modèle B est même légèrement meilleur.

La variance asymptotique associée à la densité $q^*_{n_0,\varepsilon}$ est représentée en figure 1, pour les deux modèles, en fonction du paramètre de mélange ε. Dans le cas qui nous intéresse ici, $g_{n_0}(x) = \sqrt{p_{n_0}(x)}$, avec $p_{n_0}(x) = \mathbb{P}^h_{n_0}(f(x) < y_{\text{crit}})$. La variance obtenue pour la loi instrumentale $q \propto p_{n_0}\,\pi$ (Dubourg *et al.*, 2013) est également représentée, et s'avère assez similaire. Pour $\varepsilon \approx 0$, il est frappant de constater que les lois instrumentales déduites du modèle B — qui est pourtant meilleur que A pour la prédiction des défaillances — sont très mauvaises, avec des variances supérieures à celle de Monte Carlo. L'utilisation d'un mélange défensif avec $\varepsilon \approx 10^{-2}$ permet d'obtenir dans les deux cas un gain appréciable par rapport à Monte Carlo, avec une dégradation acceptable dans le cas du modèle A.

2. LHS « maximin » sur un hyper-rectangle obtenu en tronquant les supports non bornés
3. le classement d'un point x étant déterminé par la valeur de la moyenne a posteriori de $f(x)$

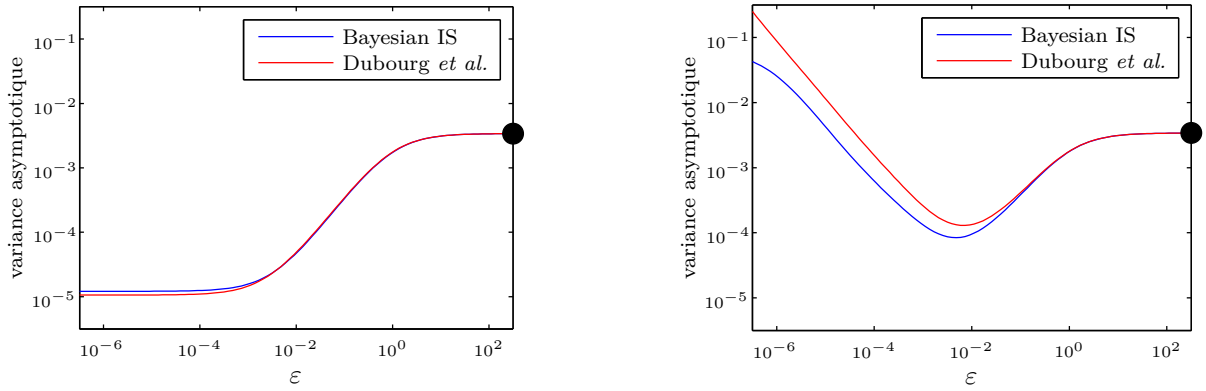

FIGURE 1 – Variance asymptotique en fonction du paramètre de mélange ε, pour le modèle A (gauche) et le modèle B (droite). Les courbes bleues correspondent à la loi instrumentale (9), les courbes rouges à une version défensive de la loi $q \propto p_{n_0}\,\pi$ (Dubourg *et al.*, 2013). La variance asymptotique est estimée par Monte Carlo sur l'échantillon de référence, à partir de l'équation (2). Le point noir sur la droite indique la variance asymptotique de l'estimateur de Monte Carlo, à savoir $\alpha\,(1-\alpha) \approx \hat{\alpha}_m^{\mathrm{MC}}\left(1-\hat{\alpha}_m^{\mathrm{MC}}\right)$.

Nos travaux futurs porteront sur le réglage automatique de paramètre ε, et sur l'évaluation théorique et numérique de la procédure en deux étapes discutée dans cet article.

Références

Y. AUFFRAY, P. BARBILLON et J.-M. MARIN : Estimation of rare events probabilities in computer experiments. arXiv:1105.0871v2 [stat.CO], 2012.

J. BECT et E. VAZQUEZ : Bayes-optimal importance sampling for computer experiments. *In 7th International Workshop on Simulation (IWS 2013), Rimini, Italy, May 21–25*, 2013.

V. DUBOURG : *Adaptive surrogate models for reliability analysis and reliability-based design optimization.* Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal / Clermont II, 2011.

V. DUBOURG, F. DEHEEGER et B. SUDRET : Metamodel-based importance sampling for structural reliability analysis. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 33:47–57, 2013.

T. HESTERBERG : Weighted average importance sampling and defensive mixture distributions. *Technometrics*, 37(2):185–194, 1995.

J. C. NEDDERMEYER : Computationally efficient nonparametric importance sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 104(486):788–802, 2009.

A. OWEN et Y. ZHOU : Safe and effective importance sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 95(449):135–143, 2000.

C. ROBERT et G. CASELLA : *Monte Carlo Statistical Methods. Second edition.* Springer Texts in Statistics. 2004.

L. P. SWILER et N. J. WEST : Importance sampling: Promises and limitations. *In 51st AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Material Conference*, 2010.

P. ZHANG : Nonparametric importance sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 91 (435):1245–1253, 1996.