

ESTIMATION DES MESURES DE SENSIBILITÉ GLOBALE BASÉES SUR LES DÉRIVÉES VIA UN MÉTAMODÈLE PAR PROCESSUS GAUSSIEN

Matthias De Lozzo ¹ & Amandine Marrel ²

¹ CEA, DEN, DER, F-13108 Saint Paul Lez Durance - matthias.delozzo@cea.fr

² CEA, DEN, DER, F-13108 Saint Paul Lez Durance - amandine.marrel@cea.fr

Résumé. Les phénomènes physiques sont souvent étudiés via des simulateurs numériques aux entrées incertaines, dont les impacts sur la sortie peuvent être quantifiés grâce à une analyse de sensibilité globale (GSA). Les indices de Sobol, basés sur une décomposition de la variance de sortie, sont souvent utilisés pour une GSA quantitative. Récemment, des mesures de sensibilité globale basées sur les dérivées (DGSMs), avec un sens plus physique, ont été étudiées. Cependant, les simulateurs fournissent rarement le gradient de la sortie, compliquant l'estimation des DGSMs. Pour pallier ce problème, nous estimons les DGSMs via un métamodèle par processus gaussien (GPM) approchant le simulateur.

Nous proposons deux estimateurs de DGSM basés sur ce GPM : un estimateur *plug-in* défini par le DGSM du prédicteur du GPM et un autre estimateur défini par l'espérance du DGSM associé à une instance du GPM, pouvant s'accompagner d'un intervalle de confiance. Pour des noyaux gaussiens et des lois uniformes, des formules analytiques sont données pour ces estimateurs. Pour les autres situations, des méthodes d'estimation de type Monte-Carlo sont proposées : une version propagative de l'échantillonneur de Gibbs et une approximation par loi du chi-deux. Un test de significativité est également construit pour le criblage, permettant d'isoler les entrées non influentes. La convergence des estimateurs et les méthodes de Monte-Carlo sont comparées sur une fonction analytique. Enfin, ces développements sont appliqués à un modèle de transport hydrogéologique de strontium 90, montrant l'intérêt du test de significativité et discutant du sens des DGSMs.

Mots-clés. Analyse de sensibilité, mesures de sensibilité globale basées sur les dérivées (DGSMs), métamodèle par processus gaussien, test de significativité, criblage.

Abstract. Physical phenomena are often studied using numerical simulators with uncertain inputs, whose impacts on the output can be quantified by a global sensitivity analysis (GSA). Sobol' indices, based on output variance decomposition, are commonly used to perform quantitative GSA. Recently, other tools have been studied, closer to physical practices, such as the derivative-based global sensitivity measures (DGSMs). However, numerical simulators rarely provide the output gradient, making harder the DGSM estimation. To address this limitation, we estimate the DGSMs using a Gaussian process metamodel (GPM) which approximates the simulator.

Based on this GPM, we propose two DGSM estimators: a plug-in one defined by the DGSM of the GPM predictor and another one defined by the expectation of the DGSM associated a GPM instance. The latter can be accompanied by a confidence interval. For Gaussian kernels and uniform input laws, analytical formula are given for both DGSM estimators. For all other situations, Monte-Carlo based methods are proposed: a propagative version of the Gibbs sampler and a chi-square approximation. Moreover, a significance test for the full-GPM based estimator is proposed for screening. The convergence of both estimators and the Monte-Carlo approaches are compared on an analytical function. Finally, we apply our work to a model of strontium 90 hydrogeological migration, showing the interest of the significance test and discussing the meaning of the DGSMs.

Keywords. Sensitivity analysis, derivative-based global sensitivity measures (DGSMs), Gaussian process model, significance test, screening.

1 Analyse de sensibilité au moyen d'un métamodèle par processus gaussien (GPM)

Nous considérons le simulateur numérique :

$$\begin{cases} f : \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ x = (x_1, \dots, x_d) \mapsto f(x) \end{cases}$$

dont les paramètres d'entrée x_1, \dots, x_d sont incertains. Nous cherchons à expliquer l'incertitude sur la sortie $f(x)$ à partir des incertitudes sur les paramètres d'entrée.

En analyse de sensibilité globale (GSA), les paramètres x_1, \dots, x_d sont considérés comme des réalisations des variables aléatoires indépendantes X_1, \dots, X_d de lois de probabilité connues. On s'intéresse alors à quantifier la dépendance entre ces variables et la sortie aléatoire $Y = f(X)$. On utilise pour cela d indices de sensibilité D_1, \dots, D_d estimés à partir d'un n -échantillon $(X^{(i)}, Y^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$ composé d'évaluations du code de calcul f , où les $(X^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$ sont des réalisations indépendantes et identiquement distribuées de X .

La contribution d'une variable d'entrée X_* dans la variabilité de la sortie $f(X)$ peut alors être mesurée au moyen de \hat{D}_* , l'estimateur de D_* . Il devient ainsi possible d'ordonner ces entrées et d'isoler celles dont les influences sur la sortie sont négligeables.

Néanmoins, le simulateur numérique f est souvent coûteux en temps de calcul et le nombre n d'évaluations disponibles est souvent insuffisant pour une estimation robuste des indices de sensibilité. Pour pallier ceci, une méthode consiste à construire un modèle de substitution \hat{f} de f à partir de n simulations $(x^{(i)}, y^{(i)})$. Ces n simulations, classiquement choisies via un plan de type *space-filling* (voir [5] par exemple), constituent la base d'apprentissage. Ce modèle \hat{f} étant économique en temps de calcul, on l'utilise à la place du simulateur numérique f pour estimer les indices de sensibilité au moyen d'un nombre d'évaluations $N \gg n$ (voir [4] et [9] par exemple).

Dans nos travaux, nous choisissons de travailler avec le métamodèle par processus gaussien [6] dont la formulation stochastique fournit non seulement un estimateur \hat{f} , mais aussi une distribution de probabilité pour le simulateur f .

Métamodèle par processus gaussien

Soit Ω un espace aléatoire. On suppose que le code de calcul f peut être modélisé par une instance d'un processus gaussien (GP) $Z : (\mathbb{R}^d, \Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ défini par :

$$Z(x; \omega) \sim \mathcal{GP}(\beta, \sigma^2 (r(x, x') + \tau^2 \delta_{xx'})) \quad (1)$$

de moyenne β et de structure de covariance $\sigma^2 (r(x, x') + \tau^2 \delta_{xx'})$. $r(x, x')$ est une fonction séparable à noyau paramétrée par un vecteur d'hyperparamètres $\theta \in \Theta$.

À partir de (1), nous associons au n -échantillon $\mathcal{A} = (x^{(i)}, y^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$ la matrice de corrélation $R \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ définie par $R = (r(x^{(i)}, x^{(j)} + \tau^2 \delta_{ij}))_{1 \leq i, j \leq n}$ ainsi que les vecteurs $k(x) = (r(x, x^{(1)}) \dots r(x, x^{(n)}))^T$ et $\mathbf{Y} = (y^{(1)} \dots y^{(n)})^T$. Les éléments R et k dépendent des hyperparamètres θ .

Par la suite, on note Z_C le GP défini en (1) conditionné par \mathcal{A} et $(\beta, \sigma^2, \tau^2, \theta)$:

$$Z_C(x; \omega) = \left[Z(x; \omega) \mid (X^{(i)}, Y^{(i)})_{1 \leq i \leq n}, \beta, \sigma^2, \tau^2, \theta \right] \sim \mathcal{GP}(\hat{f}(x), s^2(x, x')). \quad (2)$$

avec $\hat{f}(x) = \beta + k(x)^T \gamma$ et $s^2(x, x') = \sigma^2 (r(x, x') - k(x)^T R^{-1} k(x'))$, les espérances et covariances conditionnelles, où $\gamma = R^{-1}(\mathbf{Y} - \beta \mathbf{1})$. Les paramètres $(\beta, \sigma^2, \tau^2, \theta)$ peuvent être estimés par maximum de vraisemblance.

Le simulateur f est alors considéré comme une instance de ce GP dont l'espérance \hat{f} constitue le prédicteur de f et $s^2(x, x)$ l'estimateur de l'erreur quadratique associée.

2 Estimation des mesures de sensibilité globale basées sur les dérivées

2.1 Définition

Introduites par [7], les mesures de sensibilité basées sur les dérivées (DGSMs) du simulateur f ont récemment été étudiées par [8] et [1] comme majorants des indices de Sobol. Leur utilisation suppose qu'une forte dérivée partielle sur l'ensemble de l'espace probabilisé des paramètres d'entrée conduit à une variation importante de la sortie $f(x)$ selon l'entrée associée à la dérivée. Pour tout k dans $\{1, \dots, d\}$, le $k^{\text{ème}}$ DGSM est définie par :

$$D_k = \mathbb{E}_X \left[\left(\frac{\partial f(X)}{\partial x_k} \right)^2 \right] \quad (3)$$

avec $\mathbb{E}_X[\square] = \int_{\mathcal{X}} \square \mu_X(x)$, où $\mu_X, \mu_X(x) > 0$ sur \mathcal{X} , est la mesure de probabilité de X .

Dans ces travaux, nous proposons deux approches pour l'estimation du DGSM D_k , $k \in \{1, \dots, d\}$, en utilisant un GPM de la même manière que [4]. La première utilise seulement l'estimateur $\hat{f}(x)$ de $f(x)$ et construit l'estimateur par *plug-in* :

$$\hat{D}_k^{(1)} = \mathbb{E}_X \left[\left(\frac{\partial \hat{f}(X)}{\partial x_k} \right)^2 \right] = \gamma^T \mathbb{E}_X \left[\frac{\partial k(X)}{\partial x_k} \frac{\partial k(X)^T}{\partial x_k} \right] \gamma. \quad (4)$$

La seconde approche utilise la loi du DGSM stochastique $\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega)$ définie par la variable aléatoire $\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega) = \mathbb{E}_X \left[\left(\frac{\partial Z_C(X; \omega)}{\partial x_k} \right)^2 \right]$. De là, le DGSM D_k est estimé par un estimateur *full-GPM* qui est égal à l'espérance de $\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega)$:

$$\hat{D}_k^{(2)} = \mathbb{E}_\omega \left[\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega) \right] = \hat{D}_k^{(1)} + \mathbb{E}_X \left[\mathbb{V}_\omega \left[\frac{\partial Z_C(X; \omega)}{\partial x_k} \right] \right]. \quad (5)$$

Des intervalles de confiance associés à $\hat{D}_k^{(2)}$ peuvent également être calculés par un échantillonnage intensif de type Monte-Carlo de la variable aléatoire $\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega)$.

2.2 Implémentation numérique

2.2.1 Résultat analytique

Dans le cas particulier de fonctions de covariance à noyaux gaussiens : $r_k(x_k, x'_k) = \exp\left(-\frac{(x_k - x'_k)^2}{2\theta_k^2}\right)$, $k \in \{1, \dots, d\}$, et de variables d'entrée indépendants X_1, \dots, X_d suivant des lois uniformes $X_k \sim \mathcal{U}([m_k, M_k])$, $k \in \{1, \dots, d\}$, on peut montrer que les estimateurs définis par (4) et (5) possèdent des formes analytiques permettant de se passer de méthodes numériques par Monte-Carlo pour approcher les espérances. Seules des évaluations des fonctions de densité et de répartition de la loi normale standard sont requises.

2.2.2 Approximation par Monte-Carlo

Pour des cas plus généraux où les noyaux ne sont pas gaussiens et où les lois des variables d'entrée ne sont pas toutes uniformes, des approximations d'espérances par Monte-Carlo sont nécessaires. Dans le cadre de l'estimateur par *plug-in* $\hat{D}_k^{(1)}$, un échantillonnage par Monte-Carlo intensif suffit, car l'estimateur s'écrit uniquement en terme d'intégrales simples. En revanche, pour obtenir l'estimateur (5) ou un intervalle de confiance, nous considérons deux méthodes récentes de type Monte-Carlo afin d'approcher la loi de $\widehat{RD}_k^{(2)}(\omega)$.

Disposant d'un M -échantillon $\mathbf{X} = (X^{(1)}, \dots, X^{(M)})$ et de N instances du GP défini par (2), on estime $\hat{D}_k^{(2)}$ par $(MN)^{-1} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial Z_C(X^{(i)}; \omega_j)}{\partial x_k} \right)^2$. La taille de l'échantillon M étant importante, l'objectif est de simuler rapidement les N instances de (2) en chaque point de cet échantillon. On note C_M la matrice de covariance du vecteur aléatoire gaussien $\frac{\partial Z_C(\mathbf{X}; \omega)}{\partial x_k}$.

Version propagative de l'échantillonneur de Gibbs. Une première option consiste à simuler des réalisations du vecteur gaussien $\frac{\partial Z_C(\mathbf{X}; \omega)}{\partial x_k}$ à partir de la version propagative de l'échantillonneur de Gibbs introduite par [2], et plus particulièrement via la stratégie à pivot par bloc présentée dans [2]. Cette version propagative est plus rapide que l'échantillonneur de Gibbs classique, car elle ne nécessite pas l'inversion de la matrice de grande dimension C_M .

Approximation par chi-deux. Une seconde option consiste à approcher par une loi du chi-deux décentrée la loi de la forme quadratique $Q_k(\omega; \mathbf{X}) = M^{-1} \sum_{i=1}^M \left(\frac{\partial Z_C(X^{(i)}; \omega)}{\partial x_k} \right)^2$ en utilisant les travaux de [3]. Cette méthode ne requiert pas d'inversion de matrice ou de décomposition spectrale, ce qui est avantageux lorsque la dimension de la matrice de covariance C_M est importante. Les paramètres de cette loi sont choisis de sorte à ce que son asymétrie soit égale à celle de $Q_k(\omega; \mathbf{X})$ et que la différence de kurtosis entre elle et $Q_k(\omega; \mathbf{X})$ soit minimale.

2.3 Test de significativité

Nous proposons également d'utiliser les DGSMs en criblage afin de distinguer à moindre coût les paramètres d'entrée non-influents des influents. Pour cela, nous proposons de tester la nullité du DGSM D_k en utilisant un test statistique de significativité. Dans ce cas, l'hypothèse nulle est " $\mathcal{H}_0: D_k = 0$ " tandis que l'alternative est " $\mathcal{H}_1: D_k \neq 0$ ". Sous \mathcal{H}_0 , la moyenne m_M du vecteur gaussien $\frac{\partial Z_C(\mathbf{X})}{\partial x_k}$ est le vecteur nul de \mathbb{R}^M . Par conséquent, la p -valeur associée à ce test statistique et à l'estimateur $\hat{D}_k^{(2)}$ est $p_{\text{val},k} = \mathbb{P} \left[Q_k(\omega; \mathbf{X}) > \hat{D}_k^{(2)} | \mathcal{H}_0 \right]$. Nous utilisons ensuite au choix l'une des deux méthodes de Monte-Carlo précédentes pour approximer cette probabilité sous \mathcal{H}_0 . Ainsi, nous concluons que X_k est significative si $p_{\text{val},k}$ est inférieure à un certain niveau α , habituellement choisi égal à 5% ou 10%.

3 Discussion

Des études numériques sur la fonction analytique d'Ishigami, classiquement utilisée en analyse de sensibilité, montrent que les estimateurs des DGSMs associés aux trois entrées

ont des vitesses de convergence différentes, ce qui peut s'expliquer par des qualités de prédiction des dérivées par le GPM différentes d'une entrée à une autre (prédictivité évaluée sur une base de test). Pour corriger ces écarts, il faudrait rajouter des observations des dérivées du simulateur dans la construction du métamodèle, lorsque cela est possible.

Par ailleurs, l'estimateur *full-GPM* $\hat{D}_k^{(2)}$ est plus justifié que l'indice estimé par *plug-in* $\hat{D}_k^{(1)}$ car il intègre la variabilité moyenne du processus gaussien Z_C plutôt que de considérer sa seule espérance. Ceci est particulièrement pertinent lorsque le nombre d'observations ayant servi à la construction du métamodèle est faible.

On peut aussi voir sur ce cas test que les deux méthodes de Monte-Carlo produisent des estimations dont les différences sont négligeables comparées à l'erreur du métamodèle. De plus, on montre que lorsque $N \gg M$, l'approche basée sur le chi-deux est plus rapide que celle utilisant la version propagative de l'échantillonneur de Gibbs, et inversement.

Enfin, les outils proposés ont été appliqués à un modèle de transport hydrogéologique de strontium 90 comportant une vingtaine de paramètres d'entrée. Ces derniers ayant des unités physiques différentes, diverses pondérations des DGSMs ont été proposées afin de comparer les indices. Qualitativement, les estimations des DGSMs et les p -valeurs associées conduisent à des tris des variables d'entrée similaires.

Bibliographie

- [1] Lamboni, M., Iooss, B., Popelin, A.-L. et Gamboa, F. (2013), Derivative-based global sensitivity measures: General links with sobol' indices and numerical tests, *Math Comput Simul*, 87, pp. 45–54.
- [2] Lantuéjoul, L. et Desassis, N. (2012), Simulation of a gaussian random vector: A propagative version of the gibbs sampler, in *Ninth International Geostatistics Congress*.
- [3] Liu, H., Tang, Y. et Zhang, H. H. (2009), A new chi-square approximation to the distribution of non-negative definite quadratic forms in non-central normal variables, *Comput Stat Data Anal*, 53, pp. 853–856.
- [4] Marrel, A., Iooss, B., Laurent, B. et Roustant, O. (2009), Calculations of sobol indices for the gaussian process metamodel, *Reliab Eng Syst Saf*, 94, pp. 742–51.
- [5] McKay, M. D., Beckman, R. J. et Conover, W. J. (1979). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics* 21, 239–245.
- [6] Rasmussen, C. E. et Williams, C. K. I. (2005), *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning)*, The MIT Press.
- [7] Sobol, I. et Gresham, A. (1995), On an alternative global sensitivity estimator, in *Proceedings of SAMO 1995*, pp. 40–42.
- [8] Sobol, I.M. et Kucherenko, S. (2009), Derivative based global sensitivity measures and their link with global sensitivity indices, *Math Comput Simul*, 79, pp. 3009–3017.
- [9] Sudret, B. et Mai, C. V. (2014). Computing derivative-based global sensitivity measures using polynomial chaos expansions, *Reliab Eng Syst Saf*.