Contributions à l'analyse de sensibilité

Christian Lavergne

Institut de Mathématiques et de Modélisation de Montpellier

I3M, UMR CNRS 5149

juillet 2006

- Contexte
  - modèles de type « boite noire »(code de calcul informatique) :
    - déterministes,
    - entrées et sorties aléatoires,
  - modélisation de phénomènes complexes.
- Objectifs principaux
  - améliorer la prédiction (réduction de l'incertitude),
  - simplifier ou alléger le modèle (fixer les variables les moins influentes),
  - améliorer la compréhension du phénomène.
- Domaines d'applications
  - ingénierie nucléaire,
  - écologie et environnement, chimie ...

1. Analyse de sensibilité
   - Locale et globale
   - Indices de sensibilité : ex à 1,2 ou 3 variables
   - Indices de sensibilité
   - Estimation
2. Compléments
3. Incertitude de modèle et analyse de sensibilité
   - Prise en compte d'une mutation de modèle
   - Utilisation d'un modèle simplifié
4. Modèles à entrées non indépendantes
   - Le problème...
   - Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes
   - Indices de sensibilité multidimensionnels
   - Applications au code de calcul Stay'SL

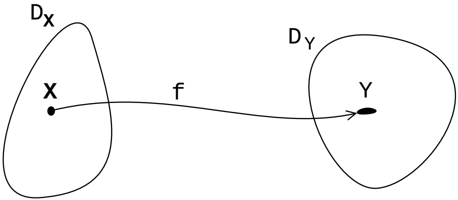
1. Analyse de sensibilité
   - Locale et globale
   - Indices de sensibilité : ex à 1,2 ou 3 variables
   - Indices de sensibilité
   - Estimation
2. Compléments
3. Incertitude de modèle et analyse de sensibilité
   - Prise en compte d'une mutation de modèle
   - Utilisation d'un modèle simplifié
4. Modèles à entrées non indépendantes
   - Le problème...
   - Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes
   - Indices de sensibilité multidimensionnels
   - Applications au code de calcul Stay'SL

1. Analyse de sensibilité
   - Locale et globale
   - Indices de sensibilité : ex à 1,2 ou 3 variables
   - Indices de sensibilité
   - Estimation
2. Compléments
3. Incertitude de modèle et analyse de sensibilité
   - Prise en compte d'une mutation de modèle
   - Utilisation d'un modèle simplifié
4. Modèles à entrées non indépendantes
   - Le problème...
   - Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes
   - Indices de sensibilité multidimensionnels
   - Applications au code de calcul Stay'SL

1. Analyse de sensibilité
   - Locale et globale
   - Indices de sensibilité : ex à 1,2 ou 3 variables
   - Indices de sensibilité
   - Estimation
2. Compléments
3. Incertitude de modèle et analyse de sensibilité
   - Prise en compte d'une mutation de modèle
   - Utilisation d'un modèle simplifié
4. Modèles à entrées non indépendantes
   - Le problème...
   - Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes
   - Indices de sensibilité multidimensionnels
   - Applications au code de calcul Stay'SL

Analyse de sensibilité

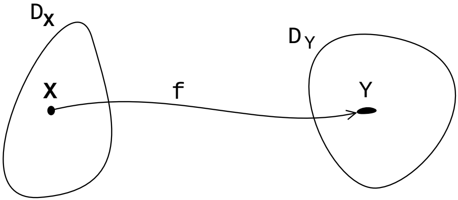
Soit le modèle $Y = f(\mathbf{X})$



L'analyse de sensibilité étudie comment des perturbations sur $\mathbf{X}$ engendrent des perturbations sur Y

Analyse de sensibilité

Soit le modèle $Y = f(\mathbf{X})$



L'analyse de sensibilité étudie comment des perturbations sur $\mathbf{X}$ engendrent des perturbations sur Y

AS locale $\mathbf{X} - - \rightarrow Y$ *valeur*

AS globale $D_{\mathbf{X}} - - \rightarrow D_Y$ *variabilité*

Analyse de sensibilité globale ...

... consiste à déterminer la part de variabilité de la réponse du modèle due à un sous ensemble de variables d'entrée.

Indicateurs utilisés :

les indices de sensibilité

Indices de sensibilité à 1,2 ou 3 variables

- 1 variable (inutile) :

  $Y = f(X)$ alors Y est aussi $= E(f(X)/X)$

  et donc $V(Y) = V(E(Y/X))$.

  Rappel : $V(Y) = V(E(Y/X)) + E(V(Y/X))$

Indices de sensibilité à 1,2 ou 3 variables

- 2 variables indépendantes ($X_1 \perp X_2$) :

$$Y = f(X_1, X_2) = E(Y/X_1, X_2).$$

Alors Y peut se décomposer sous la forme :

$$\begin{aligned} Y &= E(Y) && \rightarrow f_0 \\ &+ E(Y/X_1) - E(Y) && \rightarrow {\color{red} f_1} \\ &+ E(Y/X_2) - E(Y) && \rightarrow {\color{red} f_2} \\ &+ E(Y/X_1, X_2) - E(Y/X_1) - E(Y/X_2) + E(Y) && \rightarrow {\color{blue} f_{12}} \end{aligned}$$

Indices de sensibilité à 1,2 ou 3 variables

f_0 est une constante ;
f_1, f_2 et f_{12} sont 3 variables aléatoires d'espérance nulle et $\perp$.

Donc $V(Y) = V(f_1) + V(f_2) + V(f_{12})$ mais

$$V(f_1) = V(E(Y/X_1))$$

donc

$$\frac{V(E(Y/X_1))}{V(Y)}$$

sera donc la sensibilité au 1^{er} ordre de X_1 sur la variance de Y.

Indices de sensibilité à 1,2 ou 3 variables

- 3 variables indépendantes ($X_1 \perp X_2 \perp X_3$) :

$$Y = f(X_1, X_2, X_3) = E(Y/X_1, X_2, X_3)$$

Alors Y peut se décomposer sous la forme :

$$Y = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_{12} + f_{13} + f_{23} + f_{123}$$

avec :

$f_i = E(Y/X_i) - E(Y)$;

$f_{ij} = E(Y/X_i, X_j) - E(Y/X_i) - E(Y/X_j) + E(Y)$;

$f_{123} = E(Y/X_1, X_2, X_3) - E(Y/X_1, X_2) - E(Y/X_1, X_3) - E(Y/X_2, X_3) + E(Y/X_1) + E(Y/X_2) + E(Y/X_3) - E(Y)$

Indices de sensibilité à 1,2 ou 3 variables

Tous les $f_.$ sont variables aléatoires d'espérance nulle et $\perp$.

donc :
$\frac{V(f_i)}{V(Y)}$ sera donc la sensibilité au 1^{er} ordre de la variable X_i sur la variance de Y ;
$\frac{V(f_{ij})}{V(Y)}$ sera donc la sensibilité de l'interaction des variables X_i et X_j sur la variance de Y.

Indices de sensibilité pour modèle linéaire

Soit le modèle linéaire $Y = \sum_{i=1}^{p} \alpha_i X_i$ avec $X_i \perp X_j \quad \forall i \neq j$.

La variance de Y s'écrit $\quad V(Y) = \sum_{i=1}^{p} \alpha_i^2 V(X_i)$.

La part de variance due à X_i est $\alpha_i^2 V(X_i)$.

$\Rightarrow$ on obtient une décomposition de la variance de Y en fonction des X_i.

La sensibilité de Y à X_i est quantifiée par l'indice Standardized Regression Coefficient :

$$\alpha_i^2 \frac{V(X_i)}{V(Y)} = SRC_i$$

Si le modèle n'est pas linéaire

Lorsqu'il n'est possible de faire **aucune hypothèse** sur le modèle (cas général), on définit des indices de sensibilité à partir d'une décomposition de la variance de Y.

Définition des indices de sensibilité 1/3

Soit le modèle $Y = f(X_1, \ldots, X_p)$ avec $X_i \in \mathbb{R}$ et $X_i \perp X_j$.
Si f intégrable, elle peut se décomposer (Sobol[1993]) en

$$f(x_1, \ldots, x_p) = f_0 + \sum_{i=1}^{p} f_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq p}^{p} f_{ij}(x_i, x_j) + \ldots + f_{1\ldots p}(x_1, \ldots, x_p) \qquad (1)$$

avec

$$\begin{aligned} E_{i_k}[f_{i_1 \ldots i_s}] &= 0 \quad \forall \quad 1 \leq i_1 \leq \ldots \leq i_k \leq \ldots \leq i_s \leq p & (2) \\ E[f_{i_1 \ldots i_s} f_{i_1 \ldots i_t}] &= 0 \quad \text{si} \quad (i_1 \ldots i_s) \neq (i_1 \ldots i_t) \end{aligned}$$

En écrivant (1) pour des variables aléatoires, et en utilisant (2), on obtient :

$$\begin{aligned} f_0 &= E[Y] \\ f_i(X_i) &= E[Y|X_i] - f_0 \\ f_{ij}(X_i, X_j) &= E[Y|X_i, X_j] - f_i - f_j - f_0 \\ &\ldots \end{aligned}$$

Définition des indices de sensibilité 2/3

ainsi, en utilisant cette décomposition, la variance de Y se décompose en :

$$V(Y) = D = \sum_{i=1}^{p} D_i + \sum_{1 \leq i < j \leq p}^{p} D_{ij} + \ldots + D_{1\ldots p}$$

où

$$\begin{aligned} D_i &= V(f_i) = V(E[Y|X_i]) \\ D_{ij} &= V(f_{ij}) = V(E[Y|X_i, X_j] - E[Y|X_i] - E[Y|X_j]) \\ D_{ijk} &= V(f_{ijk}) \\ &= V(E[Y|X_i, X_j, X_k] - E[Y|X_i, X_j] - E[Y|X_i, X_k] \\ &\qquad - E[Y|X_j, X_k] - E[Y|X_i] - E[Y|X_j] - E[Y|X_k]) \\ &\ldots \end{aligned}$$

Définition des indices de sensibilité 3/3

on définit alors les indices de sensibilité :

- de premier ordre (sensibilité de Y à X_i)

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

- de deuxième ordre (sensibilité de Y à l'interaction entre X_i et X_j)

$$S_{ij} = \frac{D_{ij}}{D} = \frac{V(E[Y|X_i, X_j] - E[Y|X_i] - E[Y|X_j])}{V(Y)}$$
$$\stackrel{\perp}{=} \frac{V(E[Y|X_i, X_j]) - D_i - D_j}{V(Y)}$$

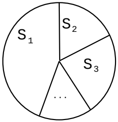
- etc ...

Interprétation

Pour un modèle à p variables d'entrées indépendantes :

$$\sum_{i=1}^{p} S_i + \sum_{1 \leq i < j \leq p}^{p} S_{ij} + \ldots + S_{1 \ldots p} = 1$$

ce qui permet de les interpréter facilement,



plus l'indice est grand, plus la variable ou le groupe de variables est important vis à vis de la variance de Y

Indices de senibilité totaux

Le nombre d'indices de sensibilité, $2^p - 1$, devient vite grand.
On introduit alors l'indice de sensibilité total

$$S_{T_i} = \text{somme de tous les indices relatifs à } X_i$$

qui exprime la sensibilité de Y à X_i sous toutes ses formes, i.e. à X_i seule et en interaction avec d'autres variables.

Ex : $p = 3$ $\qquad Y = f(X_1, X_2, X_3)$

$$S_{T_1} = S_1 + S_{12} + S_{13} + S_{123}$$

Méthodes d'estimation

- McKay
- FAST *(Fourier Amplitude Sensitivity Test)*
- Sobol
  - basée sur des estimations de Monte Carlo,
  - des améliorations existent :
    - échantillonnage stratifié,
    - LHS sampling,
    - Quasi Monte Carlo (séquences de Sobol $LP\tau$).

Estimation de Sobol

Indice de premier ordre : $S_i = \frac{D_i}{D} = \frac{V(E[Y|X_i])}{V(Y)}$

$D = V(Y)$ est estimée classiquement par

$$D \simeq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_{k1}^1, \ldots, x_{kp}^1)^2 - f_0{}^2$$

où $(x_{k1}^1, \ldots, x_{kp}^1)_{k=1 \ldots N}$ est un premier échantillon de simulations des variables d'entrée,
et où f_0 est l'estimateur classique de l'espérance de Y.

Estimation de Sobol

Indice de premier ordre : $S_i = \frac{D_i}{D} = \frac{V(E[Y|X_i])}{V(Y)}$

$D = V(Y)$ est estimée classiquement par

$$D \simeq \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(x_{k1}^1,\dots,x_{ki-1}^1,x_{ki}^1,x_{ki+1}^1,\dots,x_{kp}^1) f(x_{k1}^1,\dots,x_{ki-1}^1,x_{ki}^1,x_{ki+1}^1,\dots,x_{kp}^1) - {f_0}^2$$

et D_i est estimée par

$$D_i \simeq \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(x_{k1}^1,\dots,x_{ki-1}^1,x_{ki}^1,x_{ki+1}^1,\dots,x_{kp}^1) f(x_{k1}^2,\dots,x_{ki-1}^2,x_{ki}^1,x_{ki+1}^2,\dots,x_{kp}^2) - {f_0}^2$$

où $(x_{k1}^2,\dots,x_{kp}^2)_{k=1\dots N}$ est un second échantillon de simulations des variables d'entrée.

Incertitude de modèle

- Que deviennent les indices de sensibilité estimés si le **modèle change** (mutation) ?
- Comment prendre en compte, dans les résultats de sensibilité, l'utilisation d'un **modèle simplifié** ?

Modèles à entrées corrélées

- Comment réaliser (interpréter) une analyse de sensibilité lorsque les variables d'**entrée** ne sont **pas indépendantes** ?

Mutation de modèle

Que deviennent les indices de sensibilité si le modèle change ?

- une analyse de sensibilité a été réalisée sur un modèle M_1,
- ce modèle doit être modifié (nouvelle information, changement dans le processus modélisé...) en M_2,
- peut-on déduire les indices de sensibilité de M_2 à partir de ceux de M_1 (de façon exacte) ?

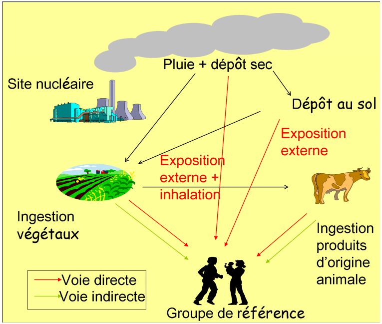
  (et ainsi économiser le coût d'une nouvelle analyse)

Méthodologie :

- Un listing exhaustif des mutations n'est pas envisageable
- pour chaque mutation, existe t-il un lien entre indices de sensibilité avant et après mutations ?

Le code de calcul GASCON

GASCON quantifie les transferts dans l'environnement et son impact sur l'homme suite à un rejet atmosphérique continu de radionucléides.



Temps de calcul trop long $\Rightarrow$ utilisation de surfaces de réponse*

$$\begin{aligned} Y - \alpha_0 &= \alpha_1 X_1 X_2 X_3 X_4 X_5 + \alpha_2 X_1 X_2 X_3 X_4 X_5^2 + \alpha_3 X_1 X_2 X_3 X_6 X_5 + \alpha_4 X_1 X_2 X_3 X_6 X_5^2 \\ &\quad + \alpha_5 X_1 X_7 X_8 X_9 X_5 + \alpha_6 X_1 X_7 X_8 X_9 X_5^2 + \alpha_7 X_1 X_7 X_8 X_{10} X_5 \end{aligned}$$

* modèle de régression multiple ajusté sur une base de données de 1000 simulations de GASCON.

Exemple de mutation de modèle dans GASCON

On suppose les variables X_1 et X_5 fixées.
On suppose avoir réalisé les AS séparément sur

$$\begin{aligned} Y_1 &= \alpha_1 x_1 X_2 X_3 X_4 x_5 + \alpha_2 x_1 X_2 X_3 X_4 x_5^2 \\ &\quad + \alpha_3 x_1 X_2 X_3 X_6 x_5 + \alpha_4 x_1 X_2 X_3 X_6 x_5^2 \end{aligned}$$

et $\quad Y_2 = \alpha_5 x_1 X_7 X_8 X_9 x_5 + \alpha_6 x_1 X_7 X_8 X_9 x_5^2 + \alpha_7 x_1 X_7 X_8 X_{10} x_5$

Ces deux modèles correspondent à deux chaînes alimentaires particulières (lait de brebis et lait de chèvre).

Typologie de la mutation :

soient $Y_1 = f_1(X_1, \ldots, X_p)$ et $Y_2 = f_2(X_{p+1}, \ldots, X_{p+q})$.
on s'intérèsse à $Y = Y_1 + Y_2$.

Mutation : somme de deux modèles

hyp : $Y = Y_1 + Y_2 = f_1(X_1, \ldots, X_p) + f_2(X_{p+1}, \ldots, X_{p+q})$.
Comme

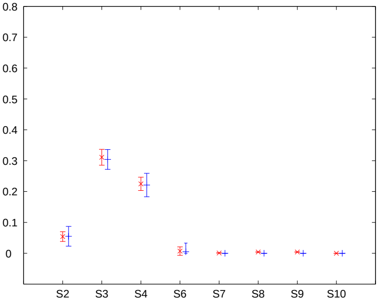
$$\begin{aligned} E[Y|X_j] &= E[f_1(X_1, \ldots, X_p) + f_2(X_{p+1}, \ldots, X_{p+q})|X_j] \\ &= \begin{cases} E[Y_1|X_j] & \text{si} \quad 1 \leq j \leq p \\ E[Y_2|X_j] & \text{si} \quad p+1 \leq j \leq p+q \end{cases} \end{aligned}$$

on a

$$S_j = \begin{cases} S_j^{\{1\}} \times \frac{V(Y_1)}{V(Y_1)+V(Y_2)} & \text{si} \quad 1 \leq j \leq p \\ S_j^{\{2\}} \times \frac{V(Y_2)}{V(Y_1)+V(Y_2)} & \text{si} \quad p+1 \leq j \leq p+q \end{cases}$$

où $S_j^{\{1\}}$ et $S_j^{\{2\}}$ sont les indices de Y_1 et Y_2.
Rq : idem pour les indices d'ordre supérieur et totaux.

Résultats



Indices de sensibilité totaux du modèle somme.

rouge : mutation, bleu : nouvelle analyse

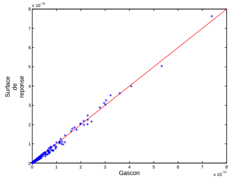
Prise en compte de l'utilisation d'un modèle simplifié

Comment prendre en compte, dans les résultats de sensibilité, l'utilisation d'un modèle simplifié ?

- le modèle de référence M_1 est trop lourd en temps de calcul pour être utilisé pour l'analyse de sensibilité,
- un modèle simplifié M_2 (régression multiple, splines, réseaux de neurones, ondelettes) est utilisé pour réaliser l'AS et ainsi approcher les indices de M_1,
- que dire de cette approximation ?

Méthodologie

- test de la validité de la régression (étude des résidus, test sur coefficient de détermination...)



modèle simplifié vs base de données Gascon (régression valide)

- si la régression n'est pas correcte
  - définition d'un schéma itératif d'amélioration de la qualité de l'ajustement du modèle simplifié,
  - estimation des indices du nouveau modèle simplifié à partir des travaux sur les mutations.

Le problème...

Soit le modèle $Y = f(X_1, \ldots, X_i, \ldots, X_j, \ldots, X_p)$
où X_i et X_j sont non indépendantes.

Dans ce cas, les indices

$$S_i = \frac{V(E[Y|X_i])}{V(Y)} \qquad\qquad S_j = \frac{V(E[Y|X_j])}{V(Y)}$$

expriment une information redondante,
puisque $E[Y|X_i]$ est fonction de X_i mais aussi de X_j.

Ainsi, l'indice de sensibilité S_i n'exprime plus exclusivement la sensibilité à la variable X_i.

Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes

- 2 variables dépendantes (X_1, X_2) :

$$Y = f(X_1, X_2) = E(Y/X_1, X_2).$$

et Y peut toujours se décomposer sous la forme :

$$Y = f_0 + f_1 + f_2 + f_{12}$$

f_0 est une constante ;
f_1, f_2 et f_{12} sont toujours 3 variables aléatoires d'espérance nulle mais elles ne sont plus $\perp$.

Donc $V(Y) = V(f_1) + V(f_2) + V(f_{12}) +$ *toutes les covariances !* qui se ramènent à un seul terme :

$$V_{12}^{*(2)} = -2 * Cov(E(Y/X_1), E(Y/X_2))$$

Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes

- 3 variables dont 2 dépendantes $((X_1, X_2) \perp X_3)$:

$$Y = f(X_1, X_2, X_3) = E(Y/X_1, X_2, X_3)$$

Alors Y se décompose toujours sous la forme :

$$Y = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_{12} + f_{13} + f_{23} + f_{123}$$

Mais $V(Y) = V_1 + V_2 + V_3 + V_{12} + V_{13} + V_{23} + V_{123} + V_{12}^{*(3)}$
où $V_{12}^{*(3)}$ contient *toutes les covariances !*.

Indices de sensibilité : 2 variables dépendantes

- p variables dont 2 dépendantes $((X_1, X_2) \perp X_3, \ldots, X_p\ )$: Dans la variance de Y se rajoute donc un terme $V_{12}^{*(p)}$ contenant *toutes les covariances !*.
- $V_{12}^{*(p)} = 0$ si $X_1 \perp X_2$ mais ce n'est pas un nombre nécessairement ≥ 0
- La corrélation entre (X_1, X_2) influe non seulement $V_{12}^{*(p)}$ mais aussi la plupart des termes $V_.$.
- $\frac{V_{12}^{*(p)}}{V(Y)}$ ne peut donc pas raisonnablement être interprété comme un indice de la sensibilité du modèle à la corrélation des variables d'entrée.

Une solution...

- considérer les 2 variables X_i et X_j comme une unique variable bidimensionnelle
- exprimer la sensibilité à cette variable (X_i, X_j) par

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

On généralise ainsi les indices de sensibilité classiques au cas multidimensionnel pour exprimer la sensibilité à des groupes de variables indépendants.

Rq : il est possible de définir des indices de sensibilité d'ordre supérieur et totaux sur ces variables multidimensionnelles.

Estimation des indices mutlidimensionnels

Indice de premier ordre :

$$S_{\{i,j\}} = \frac{V(E[Y|X_i, X_j])}{V(Y)} = \frac{D_{ij}}{D}$$

$D = V(Y)$ est estimée classiquement par

$$D \simeq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_{k1}^1, \ldots, x_{kp}^1) f(x_{k1}^1, \ldots, x_{ki-1}^1, x_{ki}^1, x_{ki+1}^1, \ldots, x_{kj-1}^1, x_{kj}^1, x_{kj+1}^1, \ldots, x_{kp}^1) - {f_0}^2$$

et D_{ij} est estimée par

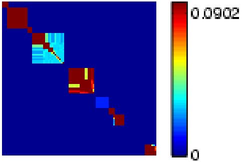
$$D_{ij} \simeq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_{k1}^1, \ldots, x_{kp}^1) f(x_{k1}^2, \ldots, x_{ki-1}^2, x_{ki}^1, x_{ki+1}^2, \ldots, x_{kj-1}^2, x_{kj}^1, x_{kj+1}^2, \ldots, x_{kp}^2) - {f_0}^2$$

Plan de la partie Analyse de Sensibilité (AS)

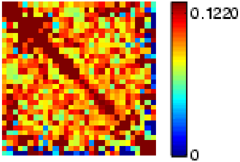
Le code Stay'SL

Stay'SL est un code de calcul utilisé par le CEA pour l'estimation de la fluence neutronique reçue par un dispositif soumis à irradiation.

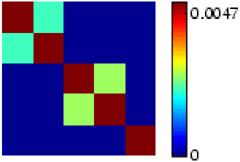
Entrées : 185 variables (taux de réactions, flux de neutrons, sections efficaces)



sections efficaces



flux



taux

Sorties : 21 variables, dont

Y_{11} : somme des flux pondérés ayant une énergie $\geq 1 MeV$.

Analyse de sensibilité multidimensionnelle de Stay'SL

On regroupe les 185 variables d'entrées en 9 groupes de variables indépendants :

- X_1 à X_5 : groupes de 30 sections efficaces (par groupe d'énergie), pour dosimètre Det1 à Det5,
- X_6 : groupe des 30 flux (par groupe d'energie),
- X_7 : taux de réactions des dosimètres Det1 et Det2,
- X_8 : taux de réactions des dosimètres Det3 et Det4,
- X_9 : taux de réactions du dosimètre Det5.

Analyse de sensibilité multidimensionnelle de Stay'SL

Protocole d'estimation :

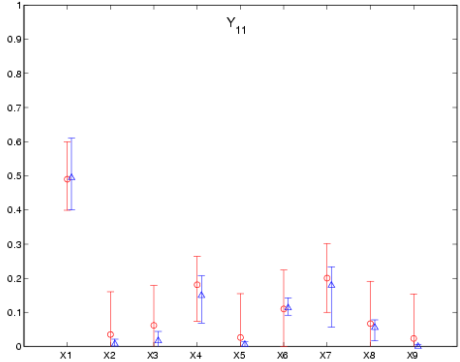
- taille des échantillons de MC : 100 000
  (12h de calcul sur un PIV à 3GHz)
- on répéte 7 fois l'analyse pour obtenir une idée de la variabilité des estimations

Résultats :

- indices de premier ordre et totaux

Analyse de sensibilité multidimensionnelle de Stay'SL

Indices de sensibilité totaux (○) et de premier ordre (△)



Analyse de sensibilité multidimensionnelle de Stay'SL

Conclusions de l'application :

- indices de premier ordre $\simeq$ indices totaux
  $\Rightarrow$ pas d'effet des interactions entre groupes de variables
- variables qui contribuent le plus à la variance de Y :
  - X_1 : sections efficaces (par groupe d'énergie) pour dosimètre Det1 ($\simeq 50\%$),
  - X_4 : sections efficaces (par groupe d'énergie) pour dosimètre Det4 ($\simeq 20\%$),
  - X_7 : taux de réactions des dosimètres Det1 et Det2.