

ANALYSE DE SENSIBILITÉ AVEC ENTRÉES DÉPENDANTES : ESTIMATION PAR ÉCHANTILLONNAGE ET PAR MÉTAMODELES DES INDICES DE SHAPLEY

Bertrand Iooss^{1,2} & Clémentine Prieur^{3,4}

¹ *EDF R&D, 6 Quai Watier, 78401 Chatou, France*

² *Institut de Mathématiques de Toulouse, 31062, Toulouse, France*

³ *Laboratoire Jean Kuntzmann, Université Grenoble Alpes, 38400 Saint Martin d'Hères*

⁴ *Inria Grenoble Alpes, équipe/projet AIRSEA*

Résumé. L'analyse de sensibilité globale d'un modèle numérique consiste à quantifier les contributions de chacun de ses paramètres d'entrée dans la variabilité de sa sortie. Malheureusement, l'interprétation des très populaires indices de Sobol' est mise en défaut en présence de corrélations entre les entrées. Récemment introduits en analyse de sensibilité, les indices de Shapley, qui consistent à allouer une part de la variance de la sortie à chaque entrée, permettent de résoudre ce problème. Sur un exemple analytique dont les valeurs théoriques des indices sont connues, nous étudions numériquement la convergence de l'estimation de ces indices. Par ailleurs, la facilité d'interprétation de ces indices est illustrée. Enfin, dans le cas d'un modèle coûteux en temps de calcul, l'estimation directe des indices de Shapley n'est pas possible. Nous montrons que le remplacement du modèle par un métamodèle (ici le krigeage) permet d'estimer ces indices avec précision.

Mots-clés. Incertitudes, Expériences numériques, Krigeage, Sobol, Shapley

Abstract. The global sensitivity analysis of a numerical model consists in quantifying the contributions of each of its input parameters in the variability of its output. Based on the functional variance analysis, the popular Sobol' indices present a faulty interpretation in the presence of correlations between inputs. Recently introduced in this context, the Shapley effects, which consist of allocating a part of the variance of the output at each input, make it possible to solve this problem. On an analytical example of which the theoretical values of the indices are known, we numerically study the numerical convergence of estimating these indices. The ease of interpreting these indices is also illustrated. In the case of a computationally expensive model, we show that the substitution of the model by a metamodel (here kriging) makes it possible to estimate these indices with precision.

Keywords. Uncertainty, Computer experiments, Kriging, Sobol', Shapley

1 Introduction

Lors de la construction et de l'utilisation d'un modèle numérique simulant des phénomènes physiques, les méthodes d'analyse de sensibilité globale sont des outils précieux (Iooss et Lemaître [1]). Elles permettent de déterminer quelles sont les variables du modèle (les entrées X_i , $i = 1 \dots d$) qui contribuent le plus à la variabilité de sa sortie Y (ici scalaire),

quelles sont au contraire les variables les moins influentes et quelles variables interagissent avec quelles autres. Les méthodes quantitatives standards sont basées sur la mesure de variance et consistent à partitionner la variance de la sortie en parts dues aux différentes entrées. Les indices de Sobol sont ainsi définis de la manière suivante (Sobol [6]) :

$$S_i = \frac{\text{Var}(\text{E}[Y|X_i])}{\text{Var}(Y)}, \quad S_{ij} = \frac{\text{Var}(\text{E}[Y|X_i X_j])}{\text{Var}(Y)} - S_i - S_j, \quad \dots \quad (1)$$

Dans le cas d'entrées indépendantes, l'interprétation de ces indices est naturelle grâce à la décomposition de la variance de Y (Sobol [6]), un indice faisant intervenir plusieurs entrées s'interprétant comme une mesure d'influence de leur interaction. En effet, leur somme est égale à un et les indices s'interprètent en pourcentage d'explication de la variance.

Des indices de sensibilité totaux ont également été définis afin d'exprimer la sensibilité "totale" de la variance de Y à une variable X_i :

$$S_{T_i} = S_i + \sum_{j \neq i} S_{ij} + \sum_{j \neq i, k \neq i, j < k} S_{ijk} + \dots \quad (2)$$

En pratique, en plus des indices de premier ordre S_i , on estime les indices totaux par

$$S_{T_i} = \frac{\text{E}(\text{Var}[Y|X_{-i}])}{\text{Var}(Y)}, \quad (3)$$

où X_{-i} est le vecteur $X = (X_1, \dots, X_d)$ privé de X_i .

Les valeurs de Shapley, bien connues en théorie des jeux et en économie, ont été récemment proposées par Owen [4] en analyse de sensibilité de modèles, via l'expression :

$$Sh_i = \sum_{u \subseteq -\{i\}} \frac{(d - |u| - 1)! |u|!}{d!} [c(u \cup \{i\}) - c(u)] , \quad (4)$$

où $c(\cdot)$ est une fonction coût et $-\{i\}$ est l'ensemble des indices $\{1 \dots d\}$ privé de i . Dans le contexte de l'analyse de sensibilité (sans l'hypothèse d'entrées indépendantes) et en utilisant $c(u) = S_u^{\text{clo}} = \text{Var}(\text{E}[Y|X_u])/\text{Var}(Y)$ (S_u^{clo} contient les effets des variables et interactions qui sont dans u), Owen [4] définit ainsi de nouveaux indices de sensibilité nommés "Shapley effects" par Song et al. [7] et que nous proposons de nommer en français "indices de Shapley". Chacun de ces indices, dont la somme vaut un, comprend une part de la variance de Y . Par ailleurs, Song et al. [7] montrent qu'il est équivalent d'utiliser $c(u) = \text{E}[\text{Var}(Y|X_{-u})]/\text{Var}(Y)$.

Dans le cas de variables indépendantes entre elles, chaque indice de Shapley Sh_i , $i = 1, \dots, d$, est encadré par les indices du premier ordre et totaux correspondants (S_i et S_{T_i}). En fait, en plus de l'effet individuel de la variable X_i , ils prennent en compte les effets d'interactions en les répartissant équitablement dans l'indice de chaque entrée qui joue dans l'interaction. Plus précisément, nous considérons ici une version renormalisée (par la variance de Y) des indices de Shapley proposés par Owen [4].

Pour effectuer une analyse de sensibilité dans le cas où les entrées du modèle présentent des dépendances entre elles, Song et al. [7] et Owen et Prieur [5] ont récemment démontré le grand intérêt des indices de Shapley. En effet, de nombreux auteurs ont précédemment tenté d'adapter le cadre des indices de Sobol', mais aucune solution n'a pour l'instant été concluante en termes d'interprétation. Dans ce papier, nous calculons tout d'abord les indices de Shapley, en les comparant aux indices de Sobol', dans le cas d'un modèle linéaire avec deux entrées corrélées. Sur ce cas simple, nous illustrons la convergence de leurs estimations numériques vers les valeurs analytiques. L'estimation des indices de Shapley étant très coûteuse, nous illustrons ensuite, sur un autre cas jouet, la possibilité et l'intérêt de remplacer le modèle numérique par un métamodèle pour cette phase d'estimation.

2 Estimation par échantillonnage direct

En reprenant des travaux précédents, Song et al. [7] proposent deux algorithmes pour estimer les indices de Shapley à partir de la formule (4). Le premier doit parcourir toutes les combinaisons possibles entre les entrées; le second échantillonne aléatoirement des permutations des entrées. Pour chacune de ces itérations, une espérance de variance conditionnelle doit être calculée dans leur algorithme.

Comme première application simple, nous considérons un modèle linéaire avec des variables gaussiennes de matrice de covariance semi-définie positive. Nous avons obtenu les résultats analytiques suivants.

Lemma 1. Soit $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \beta$ pour $\mathbf{x}, \beta \in \mathbb{R}^3$ et $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$,

$$\text{où } \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \rho\sigma_2\sigma_3 \\ 0 & \rho\sigma_2\sigma_3 & \sigma_3^2 \end{pmatrix}, \quad -1 \leq \rho \leq 1,$$

$$\text{alors } V = \text{Var}[f(\mathbf{x})] = \sum_{j=1}^3 \beta_j^2 \sigma_j^2 + 2\rho \beta_2 \beta_3 \sigma_2 \sigma_3, \quad (5)$$

$$Sh_1 = (\beta_1^2 \sigma_1^2) / V, \quad (6)$$

$$Sh_2 = [\beta_2^2 \sigma_2^2 + \rho \beta_2 \beta_3 \sigma_2 \sigma_3 + \frac{\rho^2}{2} (\beta_3^2 \sigma_3^2 - \beta_2^2 \sigma_2^2)] / V, \quad (7)$$

$$Sh_3 = [\beta_3^2 \sigma_3^2 + \rho \beta_2 \beta_3 \sigma_2 \sigma_3 + \frac{\rho^2}{2} (\beta_2^2 \sigma_2^2 - \beta_3^2 \sigma_3^2)] / V, \quad (8)$$

Comme attendu, nous avons $\sum_{j=1}^3 Sh_j = 1$ et nous voyons dans Sh_2 et Sh_3 comment se répartit l'effet de la corrélation dans chaque indice. Dans le cas de variables parfaitement corrélées, on obtient $Sh_2 = Sh_3 = (\beta_2^2 \sigma_2^2 + \beta_3^2 \sigma_3^2 + 2\rho \beta_2 \beta_3 \sigma_2 \sigma_3) / (2V)$ avec $\rho = \pm 1$.

Prenons maintenant $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 1$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$, $\sigma_3 = 2$. Les valeurs théoriques des indices de Sobol' pour ce cas particulier sont données par exemple dans Kucherenko

et al. [2]. La Figure 1 donne les résultats de l’algorithme des permutations aléatoires sur ce modèle avec $\rho = 0.9$. Les valeurs préconisées par Song et al. [7] sont prises pour la double boucle permettant le calcul de l’espérance de la variance conditionnelle ($N_i = 3$ pour la boucle interne et $N_o = 1$ pour la boucle externe). On constate que les indices convergent vers leurs valeurs théoriques, avec une erreur décroissante. Une analyse plus poussée pour le choix de m , N_o et N_i reste cependant nécessaire.

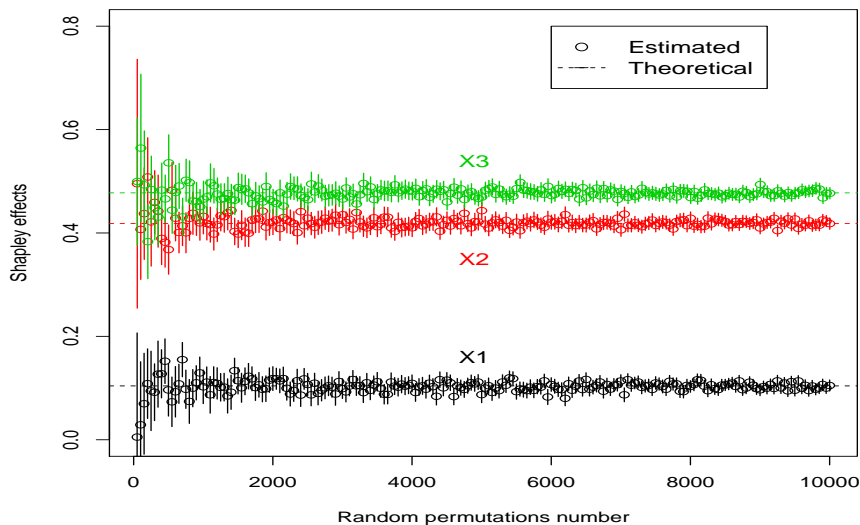


Figure 1: Estimations numériques des indices de Shapley sur le modèle linéaire. Les barres verticales correspondent aux intervalles de confiance à 95% sur les estimations (issus de la variance de la boucle Monte Carlo sur les permutations aléatoires).

En prenant $m = 10^4$ permutations aléatoires, tout en gardant $N_i = 3$ et $N_o = 1$, et en faisant varier ρ entre -0.9 et 0.9 , la Figure 2 montre le positionnement des indices de Shapley vis-à-vis des indices de Sobol’. On constate tout d’abord la bonne adéquation entre les résultats numériques et les valeurs théoriques. Par ailleurs, les indices de Shapley sont égaux aux indices de Sobol’ en l’absence de corrélation, puis se situent entre les indices du premier ordre et les indices totaux en présence de corrélation. L’effet de la corrélation semble donc partagé sur chaque variable corrélée. Les indices de Shapley sont facilement interprétables même quand les indices de Sobol’ ne le sont pas (quand $S_i > S_{T_i}$).

3 Estimation par métamodèle

Dans cette section, nous considérons le cas, relativement courant dans les applications industrielles, où le code de calcul est coûteux en temps de calcul, de telle sorte qu’il ne peut pas être évalué intensivement (par exemple seules plusieurs centaines de calculs sont possibles). L’estimation des indices de sensibilité avec une utilisation directe du modèle

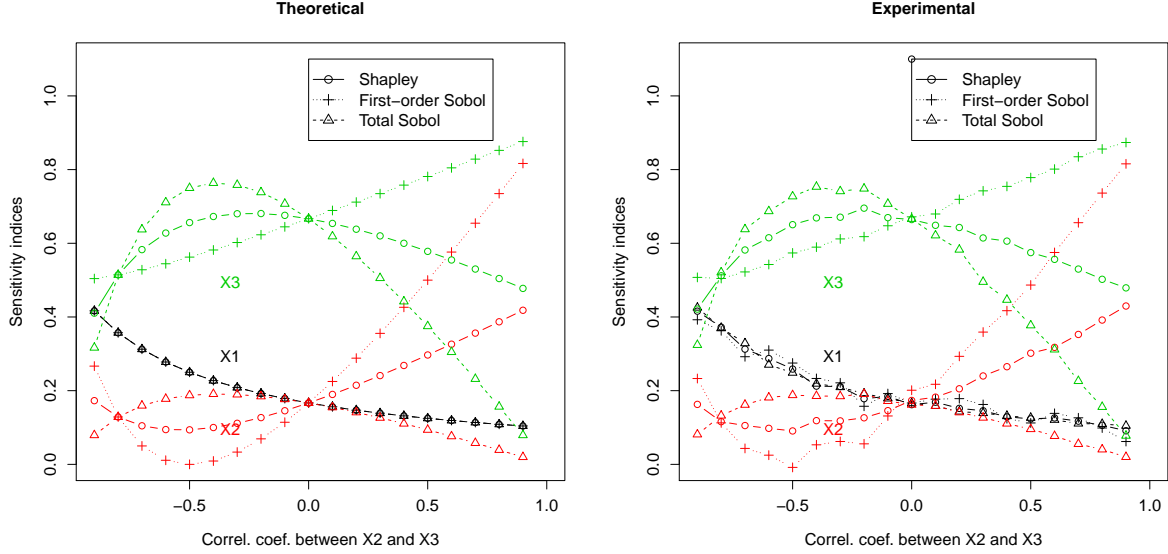


Figure 2: Indices de sensibilité sur le modèle linéaire. A gauche : valeurs théoriques. A droite : estimation numérique par la méthode des permutations aléatoires.

n'est donc pas possible. En effet, l'estimation d'indices de Sobol' nécessite pour chaque entrée plusieurs centaines ou milliers d'évaluations du modèle (Iooss et Lemaître [1]); pour les indices de Shapley, le coût d'estimation est encore plus important.

Nous proposons donc d'utiliser un métamodèle en lieu et place du modèle. Un métamodèle est un modèle mathématique d'approximation du modèle numérique, construit sur une base d'apprentissage. Nous utilisons le métamodèle de krigeage (ou processus gaussien) qui a démontré dans de nombreuses situations pratiques de bonnes capacités de prédiction (cf. Le Gratiet et al. [3] par exemple). Dans ce papier, nous utilisons juste le prédicteur du krigeage à la place du modèle dans les formules d'estimation des indices de Shapley. Un travail futur consistera à développer un algorithme exploitant la structure complète du processus gaussien permettant d'inférer l'erreur due à cette approximation (cf. Le Gratiet et al. [3] pour les indices de Sobol').

Nous étudions à présent la fonction d'Ishigami $f(X) = \sin(X_1) + 7 \sin(X_2)^2 + 0.1 X_3^4 \sin(X_1)$ où $X_i \sim \mathcal{U}[-\pi, \pi] \forall i = 1, \dots, 3$ avec une corrélation ρ non nulle entre X_1 et X_3 , sur laquelle Kucherenko et al. [2] a étudié les indices de Sobol'. Lors de la construction des métamodèles, trois tailles différentes pour la base d'apprentissage (75, 100 et 200) donnent respectivement trois coefficients de prédictivité (Q^2 qui équivaut au R^2 en prédiction) différents pour le prédicteur du krigeage : 0.86, 0.92 et 0.99. La Figure 3 montre qu'avec un métamodèle très prédictif, le calcul des indices de Shapley par le métamodèle est très satisfaisant. Les résultats se dégradent rapidement avec la diminution de la prédictivité du métamodèle. Par ailleurs, dans le cas de corrélations fortes, les indices de Shapley de X_1 et X_3 , dans lesquels les effets de leur interaction et de leur corrélation sont répartis,

ont une interprétation bien plus aisée que celle des indices de Sobol’.

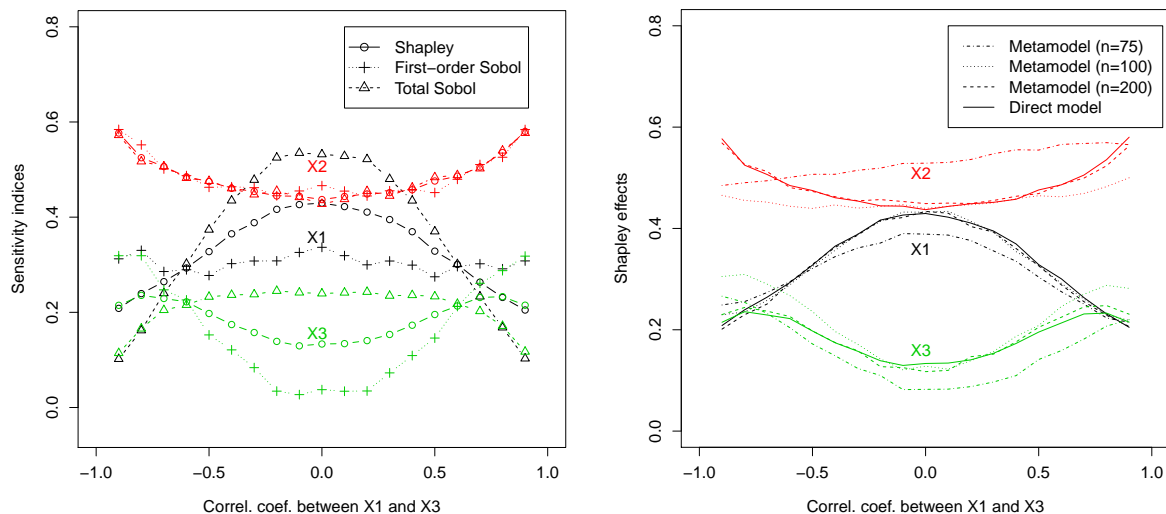


Figure 3: Indices de sensibilité sur la fonction d’Ishigami estimés par la méthode des permutations aléatoires ($m = 5 \times 10^4$, $N_o = 1$, $N_i = 3$). A gauche : estimation directe. A droite : estimation par métamodèles construits sur 3 bases d’apprentissage différentes.

References

- [1] B. Iooss and P. Lemaître. A review on global sensitivity analysis methods. In C. Meloni and G. Dellino, editors, *Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems: Algorithms and Applications*, pages 101–122. Springer, 2015.
- [2] S. Kucherenko, S. Tarantola, and P. Annoni. Estimation of global sensitivity indices for models with dependent variables. *Computer Physics Communications*, 183:937–946, 2012.
- [3] L. Le Gratiet, C. Cannamela, and B. Iooss. A Bayesian approach for global sensitivity analysis of (multifidelity) computer codes. *SIAM/ASA Journal of Uncertainty Quantification*, 2:336–363, 2014.
- [4] A.B. Owen. Sobol’ indices and Shapley value. *SIAM/ASA Journal of Uncertainty Quantification*, 2:245–251, 2014.
- [5] A.B. Owen and C. Prieur. On Shapley value for measuring importance of dependent inputs. *submitted*, 2017.
- [6] I.M. Sobol. Sensitivity estimates for non linear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiments*, 1:407–414, 1993.
- [7] E. Song, B.L. Nelson, and J. Staum. Shapley effects for global sensitivity analysis: Theory and computation. *SIAM/ASA Journal of Uncertainty Quantification*, 4:1060–1083, 2016.