

Analyse de robustesse probabiliste en quantification d'incertitude pour les codes numériques

ETICS 2024, Saissac

B. B. Ketema^{1,2}, N. Bousquet^{1,3,4}, F. Costantino², F. Gamboa², B. Iooss^{1,2,3},
R. Sueur¹

¹EDF R&D, ²IMT, ³SINCLAIR AI Lab, ⁴LPSM

27 Septembre 2024



I. INTRODUCTION

Étudier la **robustesse** d'un code industriel

$$G : X = (X_1, \dots, X_d) \mapsto Y = G(X)$$

où

- X_i quantités physiques **incertaines** \rightarrow modélisées comme v.a. $X_i \sim f_i$ où la loi est elle-même **incertaine**,

Étudier la **robustesse** d'un code industriel

$$G : X = (X_1, \dots, X_d) \mapsto Y = G(X)$$

où

- X_i quantités physiques **incertaines** \rightarrow modélisées comme v.a. $X_i \sim f_i$ où la loi est elle-même **incertaine**,
- Y variable de décision sur laquelle on met une quantité d'intérêt (QoI), souvent **quantile** q_α ou **superquantile** Q_α

Étudier la **robustesse** d'un code industriel

$$G : X = (X_1, \dots, X_d) \longmapsto Y = G(X)$$

où

- X_i quantités physiques **incertaines** \rightarrow modélisées comme v.a. $X_i \sim f_i$ où la loi est elle-même **incertaine**,
- Y variable de décision sur laquelle on met une quantité d'intérêt (QoI), souvent **quantile** q_α ou **superquantile** Q_α

Pour traiter l'incertitude, on "**perturbe**" les f_i et on étudie l'impact sur $q_\alpha(Y)$

$$f_i \rightarrow f_{i\delta} \quad \Longrightarrow \quad q_\alpha(Y) \rightarrow q_\alpha(Y^{i\delta})$$

Étudier la **robustesse** d'un code industriel

$$G : X = (X_1, \dots, X_d) \longmapsto Y = G(X)$$

où

- X_i quantités physiques **incertaines** \rightarrow modélisées comme v.a. $X_i \sim f_i$ où la loi est elle-même **incertaine**,
- Y variable de décision sur laquelle on met une quantité d'intérêt (QoI), souvent **quantile** q_α ou **superquantile** Q_α

Pour traiter l'incertitude, on "**perturbe**" les f_i et on étudie l'impact sur $q_\alpha(Y)$

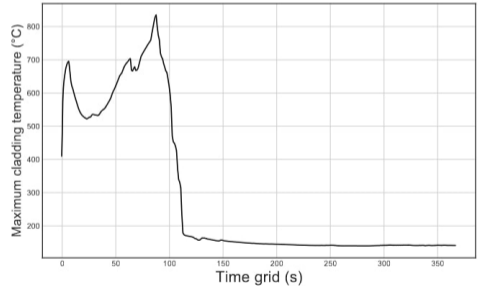
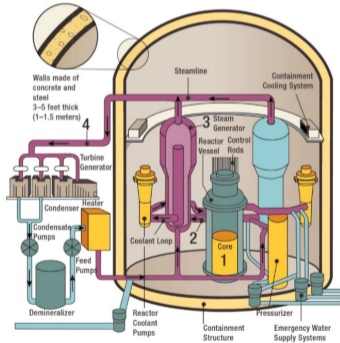
$$f_i \rightarrow f_{i\delta} \quad \Longrightarrow \quad q_\alpha(Y) \rightarrow q_\alpha(Y^{i\delta})$$

Questions:

- 1 Comment perturber les f_i ?
- 2 Comment quantifier l'impact de cette perturbation en sortie ?

Le code industriel en question

Le code CATHARE permet de faire des **études de sûreté** pour EDF. C'est un code thermohydraulique système qui simule un accident de perte de réfrigérant primaire dans la cuve est calcule l'évolution de la **température de gaine**



Source: thèse de Álvaro ROLLÓN DE PINEDO

Analyse de robustesse pour CATHARE

Voici à quoi on peut s'attendre en **analyse de robustesse (AR)**

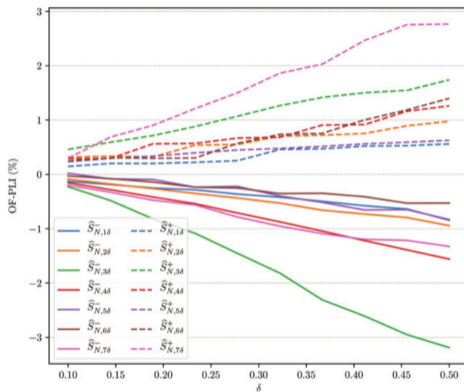


Figure: Evolution en fonction de δ du min et max de l'indice de robustesse S_i sur $\Lambda_{i\delta}$ pour CATHARE2

Comment les lois initiales sont perturbées ?

D'après [GSSI22], les lois f_i sont perturbées dans une **famille paramétrique** $\mathcal{P}_i = \{f_{i\theta}\}_{\theta \in \Theta_i}$ qui la contient. La famille \mathcal{P}_i est munie de la **métrique d'information de Fisher** (FIM)

$$(I_\theta)_{\alpha,\beta} = \mathbb{E}_{X \sim f_{i\theta}} [\partial_\alpha \log f_{i\theta}(X) \partial_\beta \log f_{i\theta}(X)]$$

Comment les lois initiales sont perturbées ?

D'après [GSSI22], les lois f_i sont perturbées dans une **famille paramétrique** $\mathcal{P}_i = \{f_{i\theta}\}_{\theta \in \Theta_i}$ qui la contient. La famille \mathcal{P}_i est munie de la **métrique d'information de Fisher** (FIM)

$$(I_\theta)_{\alpha,\beta} = \mathbb{E}_{X \sim f_{i\theta}} [\partial_\alpha \log f_{i\theta}(X) \partial_\beta \log f_{i\theta}(X)]$$

qui induit la distance de Fisher-Rao d_i sur \mathcal{P}_i

$$d_i(f_{i\theta}, f_{i\theta'}) := \inf \left\{ \int_0^1 \sqrt{I_{\theta_t}(\dot{\theta}_t, \dot{\theta}_t)} dt \mid (\theta_t)_t \text{ relie } \theta \text{ à } \theta' \text{ dans } \Theta_i \right\}$$

C'est la “**longueur du plus court chemin**” dans \mathcal{P}_i .

Comment les lois initiales sont perturbées ?

D'après [GSSI22], les lois f_i sont perturbées dans une **famille paramétrique** $\mathcal{P}_i = \{f_{i\theta}\}_{\theta \in \Theta_i}$ qui la contient. La famille \mathcal{P}_i est munie de la **métrique d'information de Fisher** (FIM)

$$(I_\theta)_{\alpha,\beta} = \mathbb{E}_{X \sim f_{i\theta}} [\partial_\alpha \log f_{i\theta}(X) \partial_\beta \log f_{i\theta}(X)]$$

qui induit la distance de Fisher-Rao d_i sur \mathcal{P}_i

$$d_i(f_{i\theta}, f_{i\theta'}) := \inf \left\{ \int_0^1 \sqrt{I_{\theta_t}(\dot{\theta}_t, \dot{\theta}_t)} dt \mid (\theta_t)_t \text{ relie } \theta \text{ à } \theta' \text{ dans } \Theta_i \right\}$$

C'est la “**longueur du plus court chemin**” dans \mathcal{P}_i . Cette distance est

- **intrinsèque** à la famille \mathcal{P}_i ,
- **invariante** par reparamétrisation,
- **comparable** sur différentes familles \rightarrow inégalité de Cramér-Rao,
- **manipulable** algorithmiquement

Comment les lois initiales sont perturbées ?

Les lois perturbées à niveau δ sont définies à travers cette distance

$$f_{i\delta} \text{ est une } \delta\text{-perturbation de } f_i \iff d_i(f_i, f_{i\delta}) = \delta$$

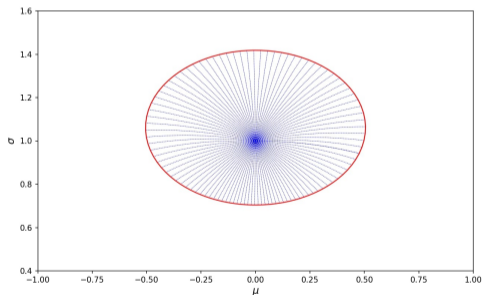
Pour $\delta > 0$ fixé, on note $\Lambda_{i\delta}$ la collection des δ -perturbations, c'est la sphère de **Fisher-Rao** centrée en f_i de rayon δ

Comment les lois initiales sont perturbées ?

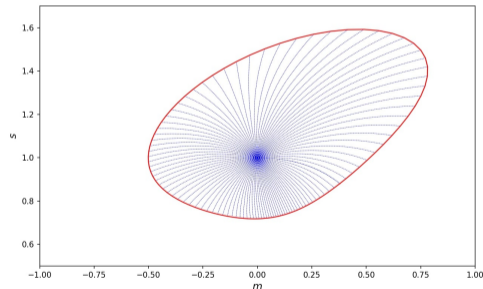
Les lois perturbées à niveau δ sont définies à travers cette distance

$$f_{i\delta} \text{ est une } \delta\text{-perturbation de } f_i \iff d_i(f_i, f_{i\delta}) = \delta$$

Pour $\delta > 0$ fixé, on note $\Lambda_{i\delta}$ la collection des δ -perturbations, c'est la sphère de **Fisher-Rao** centrée en f_i de rayon δ



Famille **normale**: sphère centrée en $(0, 1)$ de rayon $\delta = 0.5$



Famille **Gumbel**: sphère centrée en $(0, 1)$ de rayon $\delta = 0.5$

Quantification de l'impact en sortie (PLI)

L'impact sur $q_\alpha(Y)$ d'une perturbation de f_i est étudié à travers un **indice de robustesse**: pour chaque X_i

$$S_i(f_{i\delta}) = \frac{q_\alpha(Y^{i\delta})}{q_\alpha(Y)} - 1,$$

où

- $q_\alpha(Y^{i\delta})$ est le quantile de la sortie $G(X_1, \dots, X_d)$ où seule $X_i \sim f_i$ est **perturbé** en $X_i \sim f_{i\delta}$,
- $q_\alpha(Y)$ est le quantile de la sortie pour entrées **non-perturbées**

Quantification de l'impact en sortie (PLI)

L'impact sur $q_\alpha(Y)$ d'une perturbation de f_i est étudié à travers un **indice de robustesse**: pour chaque X_i

$$S_i(f_{i\delta}) = \frac{q_\alpha(Y^{i\delta})}{q_\alpha(Y)} - 1,$$

où

- $q_\alpha(Y^{i\delta})$ est le quantile de la sortie $G(X_1, \dots, X_d)$ où seule $X_i \sim f_i$ est **perturbé** en $X_i \sim f_{i\delta}$,
- $q_\alpha(Y)$ est le quantile de la sortie pour entrées **non-perturbées**

C'est bien un indice de robustesse du **quantile** car pour une perturbation $f_i \rightarrow f_{i\delta}$

- si S_i proche de 0, alors $q_\alpha(Y^{i\delta}) \approx q_\alpha(Y)$ c-à-d le quantile est **robuste**
- si S_i grand (+), alors $q_\alpha(Y^{i\delta}) \gg q_\alpha(Y)$,
- si S_i petit (-), alors $q_\alpha(Y^{i\delta}) \ll q_\alpha(Y)$

Formulation du problème d'optimisation

L'indice de robustesse S_i est fonction de $f_{i\delta}$

$$S_i : f_{i\delta} \in \mathcal{P}_i \mapsto \frac{q_\alpha(Y^{i\delta})}{q_\alpha(Y)} - 1$$

Formulation du problème d'optimisation

L'indice de robustesse S_i est fonction de $f_{i\delta}$

$$S_i : f_{i\delta} \in \mathcal{P}_i \mapsto \frac{q_\alpha(Y^{i\delta})}{q_\alpha(Y)} - 1$$

Pour $\delta > 0$ fixé, on cherche la **variation extrême** de S_i sur $\Lambda_{i\delta}$ c-à-d

$$S_{i\delta}^- = \min_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} S_i(f_{i\delta}) \quad \text{et} \quad S_{i\delta}^+ = \max_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} S_i(f_{i\delta}) \quad (*)$$

Ceci est un problème d'**optimisation riemannienne**

Formulation du problème d'optimisation

L'indice de robustesse S_i est fonction de $f_{i\delta}$

$$S_i : f_{i\delta} \in \mathcal{P}_i \mapsto \frac{q_\alpha(Y^{i\delta})}{q_\alpha(Y)} - 1$$

Pour $\delta > 0$ fixé, on cherche la **variation extrême** de S_i sur $\Lambda_{i\delta}$ c-à-d

$$S_{i\delta}^- = \min_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} S_i(f_{i\delta}) \quad \text{et} \quad S_{i\delta}^+ = \max_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} S_i(f_{i\delta}) \quad (*)$$

Ceci est un problème d'**optimisation riemannienne**

On va donc regarder pour chaque i , comment les courbes

$$\delta \mapsto S_{i\delta}^- \quad \text{et} \quad \delta \mapsto S_{i\delta}^+$$

évoluent en fonction du niveau de perturbation δ

Ce qu'il faut retenir pour la suite:

- On perturbe les f_i selon la distance de **Fisher-Rao** d_i sur \mathcal{P}_i ,
- l'impact sur la sortie est **quantifié** par l'indice de robustesse S_i ,
- $\delta > 0$ est le **niveau de perturbation**,
- S_i est une **fonction** sur \mathcal{P}_i à **optimiser** sur les sphères pour d_i dans \mathcal{P}_i

II. ILLUSTRATION DE LA MÉTHODE DE PERTURBATION ET CAS JOUET

Pour perturber une densité f_{θ_0} dans une famille $\mathcal{P} = \{f_{\theta}\}_{\theta \in \Theta}$ à **niveau** δ

Algorithme de perturbation de densité

Pour perturber une densité f_{θ_0} dans une famille $\mathcal{P} = \{f_{\theta}\}_{\theta \in \Theta}$ à **niveau** δ

1 choisir K directions v_1, \dots, v_K de **norme** δ partant de θ_0 dans Θ

Pour perturber une densité f_{θ_0} dans une famille $\mathcal{P} = \{f_{\theta}\}_{\theta \in \Theta}$ à **niveau δ**

- 1 choisir K directions v_1, \dots, v_K de **norme δ** partant de θ_0 dans Θ
- 2 suivre ces directions le long d'un **segment rectiligne** (pour la métrique de Fisher) pour une unité de temps

Pour perturber une densité f_{θ_0} dans une famille $\mathcal{P} = \{f_{\theta}\}_{\theta \in \Theta}$ à **niveau δ**

- 1 choisir K directions v_1, \dots, v_K de **norme δ** partant de θ_0 dans Θ
- 2 suivre ces directions le long d'un **segment rectiligne** (pour la métrique de Fisher) pour une unité de temps
- 3 rassembler les K points d'arrivée $\theta_{v_1}, \dots, \theta_{v_K} \in \Theta$ qui paramètrent les **densités perturbées** de f_{θ_0}

Algorithme de perturbation de densité

Pour perturber une densité f_{θ_0} dans une famille $\mathcal{P} = \{f_{\theta}\}_{\theta \in \Theta}$ à **niveau** δ

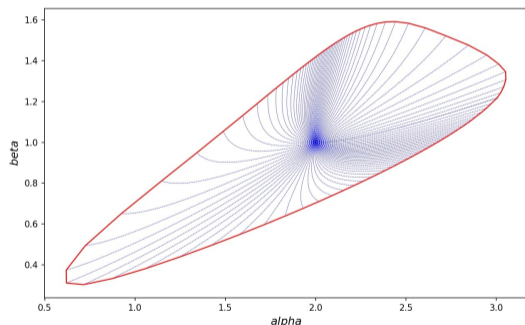
- 1 choisir K directions v_1, \dots, v_K de **norme** δ partant de θ_0 dans Θ
- 2 suivre ces directions le long d'un **segment rectiligne** (pour la métrique de Fisher) pour une unité de temps
- 3 rassembler les K points d'arrivée $\theta_{v_1}, \dots, \theta_{v_K} \in \Theta$ qui paramètrent les **densités perturbées** de f_{θ_0}

C'est un algorithme d'approximation de la sphère de **Fisher-Rao** $\Lambda_{\delta}(f_{\theta_0})$ centrée en f_{θ_0} de rayon δ

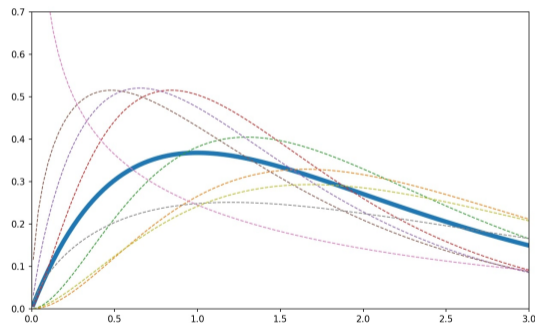
Illustration de l'algorithme précédent

On considère la famille **gamma** donnée par les densités

$$f_{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\beta x} \mathbf{1}_{x>0}, \quad \alpha, \beta > 0$$



Sphère centrée en $\Gamma(2, 1)$ de rayon $\delta = 0.5$



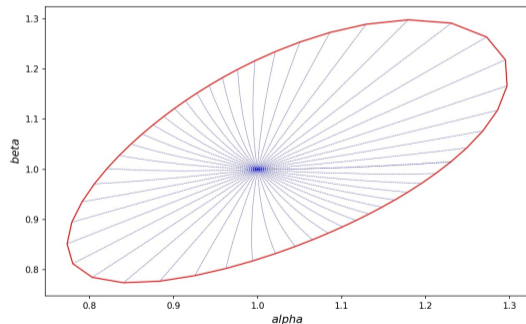
δ -perturbations de $\Gamma(2, 1)$ dans la famille **gamma**

Figure: **Sphère de Fisher-Rao** et **perturbations** dans la famille **gamma** > < ≡ ↺ ↻

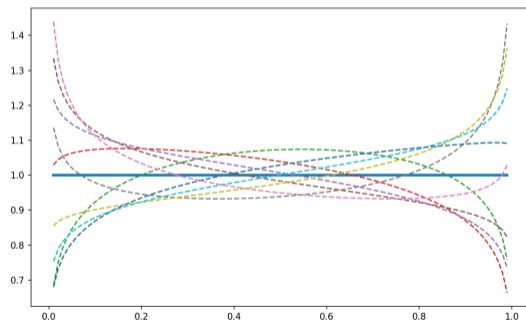
Illustration de l'algorithme précédent

Dans la famille **bêta** de densité

$$f_{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1} \mathbf{1}_{[0,1]}, \quad \alpha, \beta > 0$$



Sphère centrée en (1, 1) de rayon $\delta = 0.2$



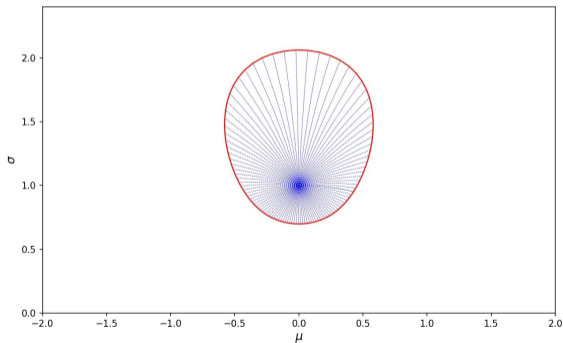
δ -perturbations de $\mathcal{U}([0, 1])$ dans la famille **beta**

Figure: **Sphère de Fisher-Rao** et **perturbations** dans la famille **bêta**

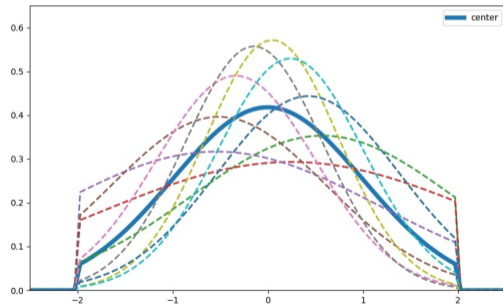
Illustrations

Pour les **gaussiennes tronquées** $\{q_\theta\}_{\theta \in \Theta}$ sur $[a, b]$ où

$$q_{(\mu, \sigma)} := \frac{f_{(\mu, \sigma)}}{\int_a^b f_{(\mu, \sigma)} dx} \mathbf{1}_{[a, b]},$$



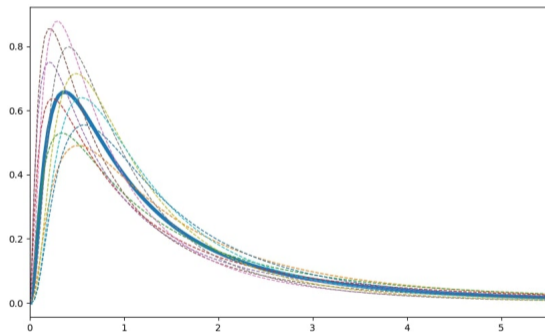
Sphère centrée en $\mathcal{N}(0, 1)$ tronquée ($\delta = 0.4$)



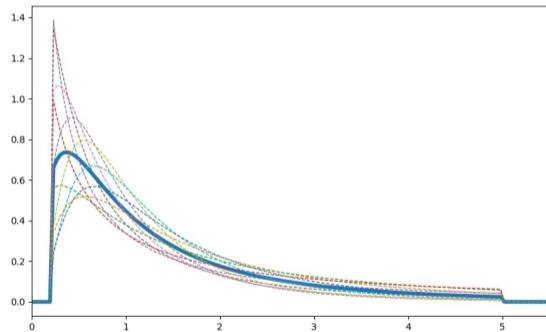
Perturbations de $\mathcal{N}(0, 1)$ tronquée ($\delta = 0.4$)

Figure: Famille des **gaussiennes tronquées** sur $[-2, 2]$

La famille **normale** et la famille **log-normale** ont la même FIM dans le cas usuel et tronqué.



Perturbations ($\delta = 0.3$) de $\log \mathcal{N}(0, 1)$



Perturbations ($\delta = 0.3$) de $\log \mathcal{N}_{[0.2, 5]}(0, 1)$

Figure: Perturbations de la log-normal dans le cas **usuel** et **tronqué**

Cas jouet: analyse de robustesse

Analyse de robustesse du modèle crue

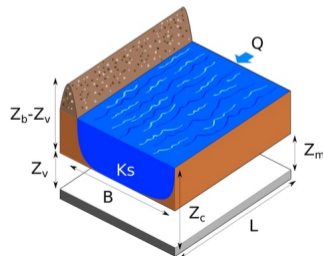
$$H := G(K, Q, Z_m, Z_v) = Q^{0.6} \left(300K \sqrt{\frac{Z_m - Z_v}{5000}} \right)^{-0.6},$$

On va résoudre pour $i \in \{K, Q, Z_m, Z_v\}$ et $\delta \in \{0.1, 0.2, \dots, 1\}$

$$\min_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} \hat{S}_i(f_{i\delta}) \quad \text{et} \quad \max_{f_{i\delta} \in \Lambda_{i\delta}} \hat{S}_i(f_{i\delta}) \quad (**)$$

La loi initiale des entrées de G :

- $K \sim \mathcal{N}_{[15,90]}(30, 7.5^2)$,
- $Q \sim \text{Gumb}_{[0,3000]}(1013, 558)$
- $Z_m \sim \text{Triang}_{[54,56]}(55)$
- $Z_v \sim \text{Triang}_{[49,51]}(50)$



Source: http://openturns.github.io/openturns/latest/usecases/use_case_flood_model.html

Cas jouet: analyse de robustesse

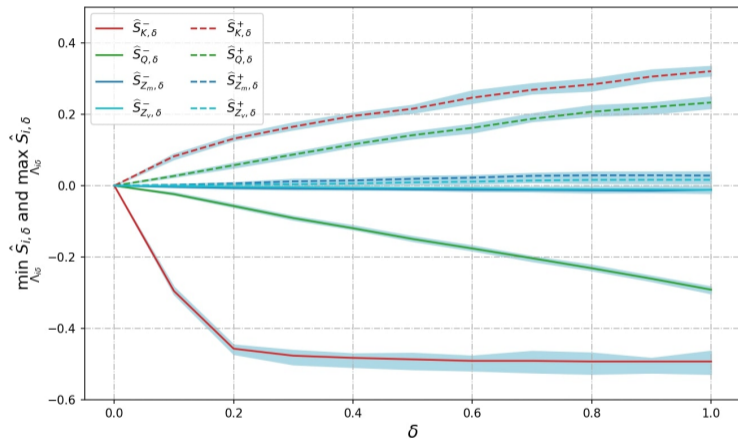


Figure: Evolution de la valeur min et max de \hat{S}_i sur la sphere $\Lambda_{i,\delta}$ en fonction de δ

III. INTERVALLE DE CONFIANCE NON-ASYMPTOTIQUE POUR UN QUANTILE

Rappelons l'**indice de robustesse** pour le **quantile**

$$S_i(f_{i\delta}) = \frac{q_{\alpha, i\delta}}{q_\alpha} - 1$$

On a un échantillon $\{Y_1 = G(\mathbf{X}^1), \dots, Y_n = G(\mathbf{X}^n)\}$ de la sortie non perturbée, on utilise

- le **quantile empirique** pour estimer q_α
- l'**échantillonnage par importance** (IS) pour estimer $q_{\alpha, i\delta}$

Rappelons l'**indice de robustesse** pour le **quantile**

$$S_i(f_{i\delta}) = \frac{q_{\alpha, i\delta}}{q_\alpha} - 1$$

On a un échantillon $\{Y_1 = G(\mathbf{X}^1), \dots, Y_n = G(\mathbf{X}^n)\}$ de la sortie non perturbée, on utilise

- le **quantile empirique** pour estimer q_α
- l'**échantillonnage par importance** (IS) pour estimer $q_{\alpha, i\delta}$

Pour q_α : on pose

$$\hat{q}_\alpha = Y_{([n\alpha])}$$

où $Y_{(1)}, \dots, Y_{(n)}$ est l'échantillon ordonné et $[n\alpha]$ est la partie entière de $n\alpha$

Rappel de l'indice de robustesse, estimation et intervalle de confiance

Pour $q_{\alpha, i\delta}$: on doit réutiliser l'échantillon $\{Y_1 = G(\mathbf{X}^1), \dots, Y_n = G(\mathbf{X}^n)\}$, donc on estime d'abord la f.d.r. $\hat{F}_{Y^{i\delta}}$ par IS

$$\hat{F}_{Y^{i\delta}}(t) = \frac{1}{\sum_{j=1}^n L_i(\mathbf{X}_i^j)} \sum_{j=1}^n L_i(\mathbf{X}_i^j) \mathbf{1}_{Y_j \leq t}$$

où $L_i = \frac{f_{i\delta}}{f_i}$ est le **rapport de vraisemblance** et on pose

$$\hat{q}_{\alpha, i\delta} = \inf\{t \in \mathbb{R} \mid \hat{F}_{Y^{i\delta}}(t) \geq \alpha\}$$

Rappel de l'indice de robustesse, estimation et intervalle de confiance

Pour $q_{\alpha, i\delta}$: on doit réutiliser l'échantillon $\{Y_1 = G(\mathbf{X}^1), \dots, Y_n = G(\mathbf{X}^n)\}$, donc on estime d'abord la f.d.r. $\hat{F}_{Y^{i\delta}}$ par IS

$$\hat{F}_{Y^{i\delta}}(t) = \frac{1}{\sum_{j=1}^n L_i(\mathbf{X}_i^j)} \sum_{j=1}^n L_i(\mathbf{X}_i^j) \mathbf{1}_{Y_j \leq t}$$

où $L_i = \frac{f_{i\delta}}{f_i}$ est le **rapport de vraisemblance** et on pose

$$\hat{q}_{\alpha, i\delta} = \inf\{t \in \mathbb{R} \mid \hat{F}_{Y^{i\delta}}(t) \geq \alpha\}$$

Intervalle de confiance: le TCL est vérifié pour \hat{q}_{α} et $\hat{q}_{\alpha, i\delta}$ [Gly96, GSS122]

$$\sqrt{n}(\hat{q}_{\alpha} - q_{\alpha}) \longrightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad \text{et} \quad \sqrt{n}(\hat{q}_{\alpha, i\delta} - q_{\alpha, i\delta}) \longrightarrow \mathcal{N}(0, \sigma_{i\delta}^2),$$

$$\text{où } \sigma^2 = \frac{\alpha(1-\alpha)}{F'_Y(q_{\alpha})^2} \quad \text{et} \quad \sigma_{i\delta}^2 = \frac{\mathbb{E}[L(X_i)^2(\mathbf{1}_{Y \leq q_{\alpha, i\delta}} - \alpha)^2]}{F'_{Y^{i\delta}}(q_{\alpha, i\delta})^2}$$

Intervalle non-asymptotique pour un quantile

Pour q_α : on utilise la **méthode de Wilks**,

Intervalle non-asymptotique pour un quantile

Pour q_α : on utilise la **méthode de Wilks**,

Pour $q_{\alpha,i\delta}$: on démontre

Proposition

Si le rapport de vraisemblance L_j est majoré par β , alors pour tout $n \geq 1$ et $\xi > 0$

$$\mathbb{P}\left(\widehat{q}_{\alpha-(\xi+\varepsilon),i\delta} \leq q_{\alpha,i\delta} \leq \widehat{q}_{\alpha+\xi+\varepsilon,i\delta}\right) \geq 1 - 2 \sum_{k=1}^{\gamma} \exp\left(\frac{-2n\xi^2}{\beta^2 \left(1 + \frac{k}{\gamma+1} + \xi\right)^2}\right),$$

où $\gamma \in \mathbb{N}^*$ est un paramètre à choisir et $\varepsilon = \frac{1}{\gamma+1}$.

Les bornes de l'intervalle de confiance sont dans $\{Y_1, \dots, Y_n\} \cup \{\pm\infty\}$, l'échantillon de départ.

Intervalle non-asymptotique pour le quantile perturbée

On estime un quantile de $\mu = \mathcal{N}(0, 1)$ avec $Y_1, \dots, Y_n \sim \mu_0 = \text{Lap}(0, 1)$, on a

- $\mu \ll \mu_0$
- $L := \frac{d\mu}{d\mu_0}$ est connue et $\sup_{x \in \mathbb{R}} L = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-0.5} =: \beta$

Pour la **médiane** $q_{0.5}(\mathcal{N}(0, 1)) = 0$, on a

$\xi = 0.05$	$\xi = 0.01$	$\xi = 0.005$
$n \approx 1.3 \times 10^3$	$n \approx 3.0 \times 10^4$	$n \approx 1.2 \times 10^5$
$[-0.21, 0.10]$	$[-0.05, 0.04]$	$[-0.03, 0.04]$

Table: Intervalle NA à 95% pour la médiane de $\mathcal{N}(0, 1)$ (pour $\gamma = 100$)

Intervalle non-asymptotique pour le quantile perturbée

On estime un quantile de $\mu = \mathcal{N}(0, 1)$ avec $Y_1, \dots, Y_n \sim \mu_0 = \text{Lap}(0, 1)$, on a

- $\mu \ll \mu_0$
- $L := \frac{d\mu}{d\mu_0}$ est connue et $\sup_{x \in \mathbb{R}} L = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-0.5} =: \beta$

Pour un **quantile extrême** $q_{0.95}(\mathcal{N}(0, 1)) \approx 1.645$, on a

$\xi = 0.05$	$\xi = 0.01$	$\xi = 0.005$
$n \approx 1.3 \times 10^3$	$n \approx 3.0 \times 10^4$	$n \approx 1.2 \times 10^5$
$[1.23, +\infty[$	$[1.50, 1.90]$	$[1.51, 1.80]$

Table: Intervalle NA à 95% pour un quantile extrême de $\mathcal{N}(0, 1)$ (pour $\gamma = 100$)

Travaux effectués:







- 1 **illustration** de la méthode de perturbation,
- 2 prise en compte de la **troncature**,
- 3 Intervalle **non-asymptotique** pour **quantile** perturbé → en cours





Travaux effectués:


- 1 **illustration** de la méthode de perturbation,
- 2 prise en compte de la **troncature**,
- 3 Intervalle **non-asymptotique** pour **quantile** perturbé → en cours

Les travaux qu'il faudra aborder

- 1 les algorithmes d'optimisation adapter au problème (\star) ,
- 2 le cas de **dépendance** des entrées (X_1, \dots, X_d) ,
- 3 choix du **rayon maximal** δ_{\max} pour la contrainte $\Lambda_{i\delta}$
- 4 **complétude** des familles $\mathcal{P}_i \implies$ les sphères $\Lambda_{i\delta}$ sont **compactes** \implies existence de solutions de (\star)

-  O. Bardou, N. Frikha, and G. Pages, *Computing VaR and CVaR using stochastic approximation and adaptive unconstrained importance sampling*, Monte Carlo Methods and Applications (2009).
-  S. Bonnabel, *Stochastic gradient descent on riemannian manifolds*, IEEE Transactions on Automatic Control **58** (2013), no. 9, 2217–2229.
-  S. Chatterjee and P. Diaconis, *The sample size required in importance sampling*, The Annals of Applied Probability **28** (2018), no. 2, 1099–1135.
-  M. P. Do Carmo and J. Flaherty Francis, *Riemannian geometry*, vol. 2, Springer, 1992.
-  J.-P. Demailly, *Complex analytic and differential geometry*, Citeseer, 1997.
-  M. Ducoffe, S. Gerchinovitz, and J. S. Gupta, *A high probability safety guarantee for shifted neural network surrogates.*, SafeAI@ AAI, 2020, pp. 74–82.

-  P. W. Glynn, *Importance sampling for monte carlo estimation of quantiles*, Mathematical Methods in Stochastic Simulation and Experimental Design: Proceedings of the 2nd St. Petersburg Workshop on Simulation, Citeseer, 1996, pp. 180–185.
-  C. Gauchy, J. Stenger, R. Sueur, and B. Iooss, *An information geometry approach to robustness analysis for the uncertainty quantification of computer codes*, Technometrics **64** (2022), no. 1, 80–91.
-  B. Iooss, V. Vergès, and V. Larget, *BEPU robustness analysis via perturbed law-based sensitivity indices*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part O: Journal of Risk and Reliability **236** (2022), no. 5, 855–865.
-  R. E. Kass, *The geometry of asymptotic inference*, Statistical Science (1989), 188–219.

-  B. B. Ketema, N. Bousquet, F. Costantino, F. Gamboa, B. Iooss, and R. Sueur, *Fisher-Rao distance between truncated distributions and robustness analysis in uncertainty quantification*, arXiv preprint arXiv:2407.21542 (2024).

Merci pour votre attention !

I. Algorithmes d'optimisation

Pour la méthode RA, on veut résoudre

$$\min_{f_\theta \in \Lambda} S(f_\theta),$$

où $S(f_\theta)$ est le Qol en sortie (ou son estimateur) et Λ est une boule géodésique \mathcal{P} . Un algorithme brute force est utilisé en discrétisant Λ .

Si le Qol est un superquantile $Q_\alpha(Y^\theta) := \mathbb{E}[Y^\theta | Y^\theta \geq q_\alpha(Y^\theta)]$, le problème précédent équivaut à

$$\min_{(a, f_\theta) \in \mathbb{R} \times \Lambda} \mathbb{E}_{X \sim f_{\theta_0}} \left[i_a(X) \frac{f_\theta(X)}{f_{\theta_0}(X)} \right],$$

où i_a est la fonction "pinball loss", dû à [BFP09]. Ce problème peut être résolu à l'aide d'algorithmes d'optimisation stochastiques [Bon13].

II. Dépendence des entrées du code

Si les variables d'entrée sont supposées indépendantes, la méthode de perturbation des densités doit être aussi effectuée de manière indépendante, ce qui était le cas dans [GSSI22, IVL22] et [KBC⁺24]. Ceci suppose que le même niveau de perturbation δ est comparable dans différentes familles paramétriques c-à-d une perturbation $\delta > 0$ a-t-elle le même “sens” dans, par exemple, la famille gaussienne et beta

$$\{\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)\}_{(\mu, \sigma)} \quad \text{and} \quad \{B(\alpha, \beta)\}_{\alpha, \beta > 0} \quad ?$$

Par ailleurs, les entrées dépendentes sont plus pertinents en pratique. Faire de la robustesse dans ce cas nécessite de perturber la loi de probabilité jointe des (X_1, \dots, X_d) . Ceci pose plusieurs questions, notamment: faut-il modifier ou pas la structure de dépendence des entrées ?

III. Choix du niveau de perturbation maximal I

La contrainte du problème

$$\min_{f_\theta \in \Lambda_i} S(f_\theta) \quad \text{and} \quad \max_{f_\theta \in \Lambda_i} S(f_\theta) \quad (\star),$$

est donnée par $\Lambda_i \subset \mathcal{P}_i = \{f_{i,\theta}\}_{\theta \in \Theta_i}$, où \mathcal{P}_i est une famille paramétrique

On veut savoir à l'avance comment déterminer le rayon δ

$$\Lambda_i := \{f \in \mathcal{P} : d_i(f, f_i) \leq \delta\} ?$$

Si δ est trop petit, résoudre (\star) ne permet pas de prouver la robustesse de G . Au contraire, si δ est trop grand (même $\delta = \infty$ i.e. $\Lambda_i = \mathcal{P}_i$), problème (\star) devient plus difficile qu'il ne devrait l'être

III. Choix du niveau de perturbation maximal II

La loi f_i , déterminée de manière expérimentale, n'est pas forcément la vraie loi de X_i .
On veut donc trouver une région de confiance (sous forme de boule) centrée en f_i et qui contiendra la vraie loi de X_i

Notons f_{i,θ_*} et f_{i,θ_0} la vraie loi et la loi f_i de X_i . Supposons que f_{i,θ_0} est obtenue comme EMV de f_{i,θ_*} étant donnée $Z_1, \dots, Z_m \sim f_{i,\theta_*}$ iid

$$\theta_0 = \hat{\theta}_m \in \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta_i} \sum_{j=1}^m \log f_{i,\theta}(Z_j)$$

On a la convergence suivante [Kas89]

$$\mathbb{P} \left(d_i(\theta_*, \hat{\theta}_m)^2 > \frac{\delta^2}{m} \right) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left(\chi_{\dim(\mathcal{P}_i)}^2 > \delta^2 \right)$$

III. Choix du niveau de perturbation maximal III

Si on prend $\delta_{i,\max}$ tel que $\mathbb{P}(\chi_{\dim(\mathcal{P}_i)}^2 > \delta_{i,\max}^2) = 0.05$, on peut garantir que, pour m grand, la vraie distribution f_{i,θ_*} est dans la boule géodésique

$$B_i := \left\{ f \in \mathcal{P}_i : d_i(f, f_{i,\hat{\theta}_m}) \leq \frac{\delta_{i,\max}}{\sqrt{m}} \right\}$$

avec probabilité 0.95, on peut donc prendre $\Lambda_i := B_i$ comme contrainte pour (\star)

IV. Complétude des familles exponentielles I

On commence avec la remarque suivante : si la contrainte Λ_i est compacte, alors (\star) admet une solution. On veut donc savoir à l'avance si $\Lambda \subset \mathcal{P}$ sont compacte ou pas. Par le théorème de Hopf-Rinow [DCFF92], on a

les boules fermées Λ sont compactes $\Leftrightarrow (\mathcal{P}, d)$ est complet

On s'intéresse aux familles exponentielles $\mathcal{P} = \{f_\theta\}_{\theta \in \Theta}$ définies par

$$f_\theta(x) = e^{x \cdot \theta - \psi(\theta)}, \quad x \in \mathbb{R}^m, \theta \in \Theta,$$

contre une mesure de référence μ , où $\psi(\theta) := \log \mathbb{E}_{f_\theta} [e^{X \cdot \theta}]$ est la fonction log-partition. On sait que la FIM de \mathcal{P} est donnée par la Hessienne $\nabla^2 \psi$. On cherche des CNS sur ψ pour que $(\mathcal{P}, \nabla^2 \psi)$ soit complet

IV. Complétude des familles exponentielles II

Un théorème de [Dem97] dit qu'une variété (M, g) est complète ssi il existe une exhaustion lisse $\varphi : M \rightarrow \mathbb{R}$ de différentielle bornée

$$|d\varphi|_g \leq 1.$$

En appliquant cela à $g = \nabla^2\psi$, on obtient la condition suivante sur $(\mathcal{P}, \nabla^2\psi)$

$$\nabla\varphi^\top \cdot \nabla^2\psi \cdot \nabla\varphi \leq 1,$$

pour une exhaustion φ sur \mathcal{P}

Si on prend $\varphi = \psi$, on obtient une condition suffisante pour la complétude donnée par l'exhaustivité de ψ et la bornitude de $d\psi$ pour la métrique $\nabla^2\psi$. Or cette condition n'est même pas vérifiée pour la famille des gaussiennes

Procédure d'obtention des IC NA pour quantile

Puisque q_α est défini grâce à F_μ

$$q_\alpha := \inf\{t \in \mathbb{R} \mid F_\mu(t) \geq \alpha\},$$

on procède en trois étapes:

- 1 d'abord on construit un IC **ponctuel** $F_\mu(t)$ pour tout t , c-à-d

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \mathbb{P}(\lambda_t^- \leq F_\mu(t) \leq \lambda_t^+) \geq 1 - \varepsilon_{n,t},$$

- 2 ensuite on démontre qu'on peut toujours le rendre **uniforme**

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{t \in \mathbb{R}} \{\tilde{\lambda}_t^- \leq F_\mu(t) \leq \tilde{\lambda}_t^+\}\right) \geq 1 - \tilde{\varepsilon}_n,$$

- 3 enfin on passe à l'**inverse généralisé** pour obtenir un IC pour le **quantile** q_α

$$\mathbb{P}(q_\alpha^- \leq q_\alpha(\mu) \leq q_\alpha^+) \geq 1 - \tilde{\varepsilon}_n.$$

V. Intervalle de confiance

Étape 1: on a regardé le papier [CD18] en premier lieu: pour $t \in \mathbb{R}$ fixé, $s > 0$ et $n = e^{K+s}$, on a

$$\mathbb{P} \left(|\hat{F}_\mu(t) - F_\mu(t)| \geq \frac{2\varepsilon_s \sqrt{F_\mu(t)}}{1 - \varepsilon_s} \right) \leq 2\varepsilon_s,$$

où $K = \mathcal{D}(\mu|\mu_0)$ et ε_s est donné par

$$\varepsilon_s = \left(e^{-s/4} + \sqrt{\mathbb{P}_{Y \sim \mu}(\log L(Y) > K + s/2)} \right)^{1/2}.$$

Or, même quand $\mu = \mu_0$, on a un niveau de confiance pour $F_\mu(t)$ de

$$1 - 2\varepsilon_s = 1 - 2e^{-s/8} = 1 - 2n^{-1/8},$$

donc pour un niveau de confiance de $1 - 2n^{-1/8} = 0.95$, il faut $n \approx 6.5 \times 10^{12}$!

On compte améliorer cela en supposant que le rapport de vraisemblance $L = \frac{d\mu}{d\mu_0}$ est borné

V. Intervalle de confiance

Étape 2: on montre que si on a un intervalle ponctuel

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \mathbb{P}(\lambda_t^- \leq F_\mu(t) \leq \lambda_t^+) \geq 1 - \varepsilon_{n,t},$$

on peut toujours le rendre uniforme

Proposition

Si $t \mapsto \lambda_{t,n}^\pm$ sont croissantes alors en choisissant $b_n \in \mathbb{N}^*$, $n \geq 1$, on a

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{t \in \mathbb{R}} \{\lambda_{t,n}^- - a_n \leq F_\mu(t) \leq \lambda_{t,n}^+ + a_n\}\right) \geq \mathbb{P}\left(\bigcap_{k=1}^{b_n} \{\lambda_{t_k,n}^- \leq F_\mu(t_k) \leq \lambda_{t_k,n}^+\}\right)$$

où $a_n := \frac{1}{b_n+1}$, $t_1 < \dots < t_{b_n}$ sont des quantiles de μ .

La preuve s'inspire de [DGG20]. Le nouvel intervalle uniforme est défini par

$\tilde{\lambda}_{t,n}^\pm := \lambda_{t,n}^\pm \pm a_n$ et le niveau de confiance par $\tilde{\varepsilon}_n := b_n \varepsilon_n$

V. Intervalle de confiance

Étape 3: on suppose que l'on a un intervalle uniforme pour F_μ

$$\mathbb{P} \left(\bigcap_{t \in \mathbb{R}} \{ \tilde{\lambda}_t^- \leq F_\mu(t) \leq \tilde{\lambda}_t^+ \} \right) \geq 1 - \tilde{\epsilon}_n$$

On note $q_{\bar{\alpha}}^\mp := (\tilde{\lambda}^\pm)^{\langle -1 \rangle}(\bar{\alpha})$ l'inverse généralisé de $t \mapsto \tilde{\lambda}_{t,n}^\pm$ évalué en $\bar{\alpha}$. On montre que

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(q_{\bar{\alpha}}^- \leq q_{\alpha} \leq q_{\bar{\alpha}}^+ \right) &\geq \mathbb{P} \left(\bigcap_{\bar{\alpha} \in (0,1)} \{ q_{\bar{\alpha}}^- \leq q_{\bar{\alpha}} \leq q_{\bar{\alpha}}^+ \} \right) = \mathbb{P} \left(\bigcap_{t \in \mathbb{R}} \{ \tilde{\lambda}_t^- \leq F_\mu(t) \leq \tilde{\lambda}_t^+ \} \right) \\ &\geq 1 - \tilde{\epsilon}_n \end{aligned}$$

puisque on a l'égalité

$$\bigcap_{t \in \mathbb{R}} \{ \tilde{\lambda}_t^- \leq F_\mu(t) \leq \tilde{\lambda}_t^+ \} = \bigcap_{\bar{\alpha} \in (0,1)} \{ q_{\bar{\alpha}}^- \leq q_{\bar{\alpha}}(\mu) \leq q_{\bar{\alpha}}^+ \},$$

car $F \leq G \iff G^{\langle -1 \rangle} \leq F^{\langle -1 \rangle}$

VI. Famille des gaussiennes tronquées: complétude

On note d la distance FR sur $\mathcal{N}_{[-1,1]}$, on a le résultat suivant

Proposition

L'espace $(\mathcal{N}_{[-1,1]}, d)$ n'est pas complet. De plus, si on note $\mathcal{U} := \{\mathcal{U}_k\}_{k \in \mathbb{R}}$ la famille à un paramètre des densités

$$\mathcal{U}_k(x) := \frac{e^{kx}}{\int_{-1}^1 e^{kx} dx} \mathbf{1}_{[-1,1]},$$

alors la distance d se prolonge continuellement sur $\mathcal{N}_{[-1,1]} \cup \mathcal{U}$.

Conjecture: Le complété de $(\mathcal{N}_{[-1,1]}, d)$ est donné par

$$\mathcal{N}_{[-1,1]} \cup \mathcal{U},$$

muni de la métrique prolongée

VII. Intervalle de confiance asymptotique

On sait que, sous certaines hypothèses, on a le TCL suivant

$$\sqrt{n}(\hat{q}_\alpha - q_\alpha) \longrightarrow \mathcal{N}(0, \sigma_\infty^2),$$

où $\sigma_\infty^2 = \frac{\mathbb{E}_{Y \sim \mu_0} [L(Y)^2 (\mathbf{1}_{Y \leq q_\alpha} - \alpha)^2]}{F'_\mu(q_\alpha)^2}$ (voir [GSSI22])

Illustration: on prend $\mu = \mathcal{N}(0, 1)$ et $\mu_0 = \text{Lap}(0, 1)$

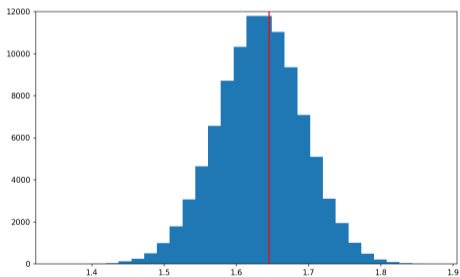


Figure: Distribution empirique de \hat{q}_α^n pour $n = 1000$ et $\alpha = 0.95$ ($m = 10^5$ rééchantillonnage).
La vraie valeur du quantile est $q_{0.95}(\mu) \approx 1.6448$ (en rouge)

VIII. Un résultat théorique

Les familles de translation-dilatation (location-scale) sont définies pour une densité initiale $p : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty)$ à support \mathbb{R} et

$$p_{\theta}(x) = \frac{1}{s} p\left(\frac{x - m}{s}\right),$$

où $\theta = (m, s) \in \mathbb{R} \times]0, +\infty[$

Proposition

La FIM pour une telle famille est donnée par $I_{\theta} = \begin{bmatrix} \alpha/s^2 & \gamma/s^2 \\ \gamma/s^2 & \beta/s^2 \end{bmatrix}$, où α, β, γ ne dépendent que de p et pas de θ . Il existe de plus une reparameterisation $P_{\alpha\beta\gamma}^T$ telle que

$$I_{\theta} = P_{\alpha\beta\gamma} \cdot \left(\frac{1}{s^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \cdot P_{\alpha\beta\gamma}^T.$$

X. Information de Fisher est préservée

Pour $\{P_\theta\}_{\theta \in \Theta}$ famille sur \mathcal{X} , $h: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ une **application bijective** et $B \subset \mathcal{Y}$ on a le diagramme suivant

$$\begin{array}{ccc} (\mathcal{X}, P_\theta) & \xrightarrow{\text{tr. sur } A} & (\mathcal{X}, P_\theta^A) \\ \downarrow h_\# & & \downarrow h_\# \\ (\mathcal{Y}, R_\theta) & \xrightarrow{\text{tr. sur } B} & (\mathcal{Y}, R_\theta^B) \end{array}$$

où

- $R_\theta := h_\# P_\theta$ la loi poussée,
- P_θ^A la version tronquée de P_θ sur $A := h^{-1}(B) \subset \mathcal{X}$,
- R_θ^B la version tronquée de R_θ sur $B \subset \mathcal{Y}$

Proposition

La matrice de Fisher est préservée par les flèches verticales.

Ceci reste vrai pour h une **statistique suffisante**

XI. Algorithme d'optimisation

- 1 choisir K vecteurs tangent v_1, \dots, v_K à f_{θ_0} dans \mathcal{P} t.q. $|v_i| = \delta$,
- 2 résoudre l'équation des géodésiques K fois en $\gamma_t \in \Theta$

$$\ddot{\gamma}^k + \sum_{1 \leq i, j \leq \dim(\mathcal{P})} \dot{\gamma}^i \bar{\Gamma}_{ij}^k \dot{\gamma}^j = 0, \quad \text{pour tout } k = 1, \dots, \dim(\mathcal{P})$$

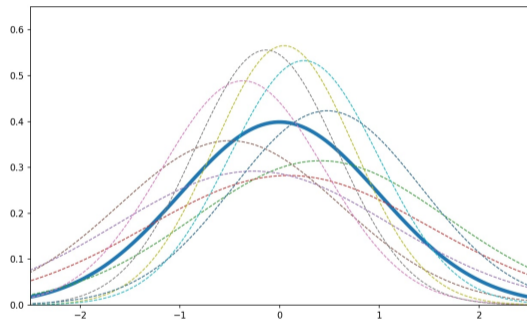
avec CI $\gamma_0 = \theta_0$ et $\dot{\gamma}_0 = v_\ell$, pour $\ell \in \{1, \dots, K\}$, où $\bar{\Gamma}$ sont les **symboles de Christoffel** (coefficients dans l'EDO) définis par

$$\bar{\Gamma}_{ij}^k = \sum_{l=1}^m \frac{g^{kl}}{2} \left(\frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{jl}}{\partial x^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} \right),$$

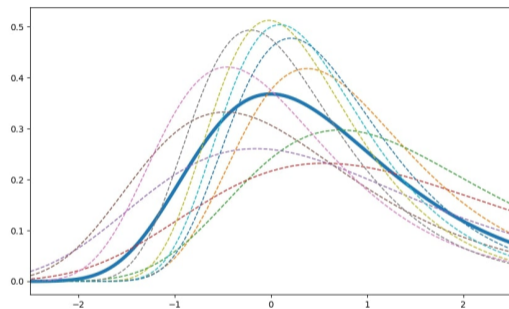
- 3 en notant $\bar{\gamma}_{v_\ell}$ la solution approchée, les **densités perturbées** auront pour paramètres

$$\theta_{v_1} = \bar{\gamma}_{v_1}(1), \dots, \theta_{v_K} = \bar{\gamma}_{v_K}(1) \in \Theta$$

Quelques densités perturbées



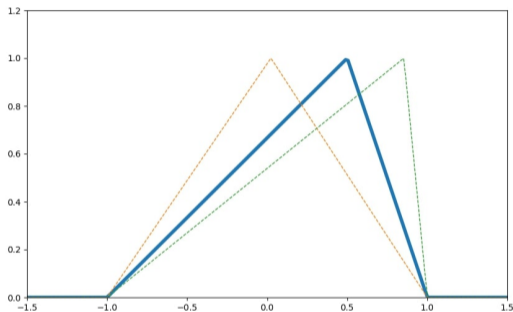
Perturbations de $\mathcal{N}(0, 1)$ pour $\delta = 0.5$



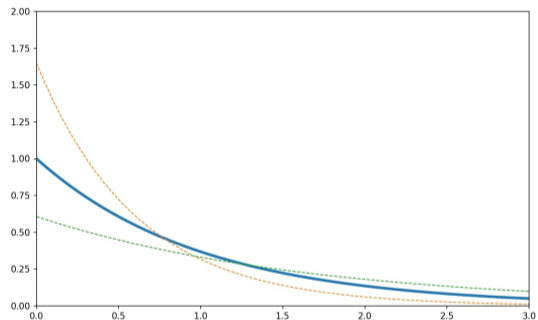
Perturbations de $\text{Gumb}(0, 1)$ pour $\delta = 0.5$

Figure: Perturbations dans deux familles différentes

Quelques densités perturbées



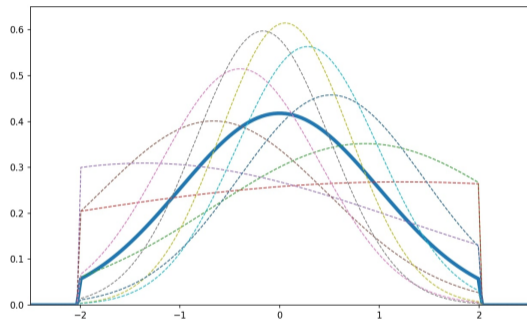
Densité **triangulaire** sur $[-1, 1]$ perturbée à niveau $\delta = 0.5$



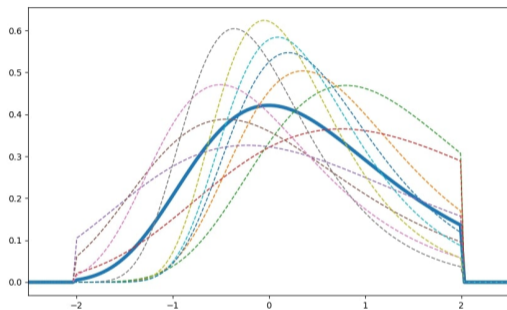
Perturbation de la **loi exponentielle** $\mathcal{E}(1)$, pour $\delta = 0.5$

Figure: Perturbations dans deux familles à un paramètre

Quelques densités perturbées



Perturbations ($\delta = 0.5$) de $\mathcal{N}(0, 1)$ tronquée sur $[-2, 2]$



Perturbations ($\delta = 0.5$) de la Gumbel $(0, 1)$ tronquée sur $[-2, 2]$

Figure: Perturbations de densités tronquées