Sequential design of experiments for estimating percentiles of black-box functions

T. Labopin-Richard V. Picheny

17 mai 2016

Contexte et objectif

- CONTEXTE : Modéle de code numérique coûteux

$$Y = g(X), \ g : \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}.$$

- OBJECTIF : estimer le quantile de la sortie Y

$$q_\alpha(Y) := F_Y^{-1}(\alpha)$$

pour un niveau $\alpha \in]0,1[$ fixé en évaluant g en le moins de points possibles.

Hypothése gaussienne

Modéle de **krigeage universel** : g est la réalisation d'un processus gaussien G centré et de fonction de covariance $c(.,.)$ fixée.

Proposition

Pour $\mathcal{A}_n = \{(x_1, g_1 := g(x_1)), \ldots, (x_n, g(x_n) := g_n)\}$, on sait que

$$\mathcal{L}(G|\mathcal{A}_n) = GP(m_n(.), k_n(.,.)),$$

où $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{X}$,

$$m_n(\mathbf{x}) = \mathbb{E}(G(\mathbf{x})|\mathcal{A}_n) = c_n(\mathbf{x})^T C_n^{-1} \mathbf{g_n},$$
$$k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathrm{Cov}\left(G(\mathbf{x}), G(\mathbf{x}')|\mathcal{A}_n\right) = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - c_n(\mathbf{x})^T C_n^{-1} c_n(\mathbf{x}'),$$

avec $c_n(\mathbf{x}) = [c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \ldots, c(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})]^T$, $C_n = [c(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{1 \leq i,j \leq n}$ et $\mathbf{g_n} = [g_1, \ldots, g_n]$.

Stratégie séquentielle et bayésienne de planification d'expériences

- Pour un budget initial N_0, on construit un échantillon d'initialisation $(\mathbf{x}_0^i, g(\mathbf{x}_0^i))_{i=1\dots N_0}$, et on calcule l'estimateur initial du quantile q_{N_0}.
- A chaque étape $n+1 \geq N_0+1$ et jusqu'à ce que le budget d'évaluations autorisées N soit atteint : connaissant les précédentes évaluations $\mathcal{A}_n$ et l'estimateur q_n, on choisit le futur point à évaluer $\mathbf{x}_{n+1}^*$ grâce à un certain critère. On évalue $g(\mathbf{x}_{n+1}^*) := g_{n+1}$ et on met à jour $\mathcal{A}_{n+1}$ et q_{n+1}.
- q_N est l'estimateur du quantile à retourner.

Stratégie séquentielle et bayésienne de planification d'expériences

- Pour un budget initial N_0, on construit un échantillon d'initialisation $(\mathbf{x}_0^i, g(\mathbf{x}_0^i))_{i=1\dots N_0}$, et on calcule l'estimateur initial du quantile q_{N_0}.
- A chaque étape $n+1 \geq N_0+1$ et jusqu'à ce que le budget d'évaluations autorisées N soit atteint : connaissant les précédentes évaluations $\mathcal{A}_n$ et l'estimateur q_n, on choisit le futur point à évaluer $\mathbf{x}_{n+1}^*$ grâce à un certain critère. On évalue $g(\mathbf{x}_{n+1}^*) := g_{n+1}$ et on met à jour $\mathcal{A}_{n+1}$ et q_{n+1}.
- q_N est l'estimateur du quantile à retourner.

BESOIN : un estimateur séquentiel du quantile et un critère de sélection du nouveau point à évaluer.

Deux estimateurs du quantile

- Conditionnellement à $\mathcal{A}_n$, la meilleure approximation de $G(\mathbf{x})$ est $m_n(\mathbf{x})$, un estimateur intuitif est donc le quantile de la moyenne du processus gaussien.

$$q_n := q(m_n(X)) = q\left(\mathbb{E}\left[G(X)|\mathcal{A}_n\right]\right). \tag{1}$$

- L'estimateur minimisant l'erreur en moyenne quadratique $\mathbb{E}\left((q - q_n)^2\right)$ parmi tous les estimateurs $\mathcal{A}_n$-mesurables est

$$q_n = \mathbb{E}\left(q(G(X))|\mathcal{A}_n\right). \tag{2}$$

Critère de sélection et méthode SUR

- Stepwise Uncertainty Reduction : Geman et al. (1996).
- On recherche des critères de la forme

$$\mathbf{x}_{n+1}^* = \underset{\mathbf{x}_{n+1} \in \mathbb{X}}{\operatorname{argmin}} J_n(\mathbf{x}_{n+1}), \tag{3}$$

- Difficulté : Evaluer l'impact potenciel du point candidat x_{n+1} sans avoir accès a son évaluation g_{n+1}.

Application au quantile : Arnaud et al. (2010), Jala et al. (2012)
$\Rightarrow$ Minimisation de la variance conditionnelle de l'estimateur (2).
$\Rightarrow$ Méthode performante en petite dimension mais trop coûteuse.

Une expression *explicite* de l'estimateur (1)

- L'estimateur (1) est $q_n = q(m_n(X))$.
- Grâce à un nouvel échantillon $\mathbf{X}_{\mathrm{MC}} = (\mathbf{x}^1_{\mathrm{MC}}, \ldots, \mathbf{x}^l_{\mathrm{MC}})$ de X, on a accès à une version empirique

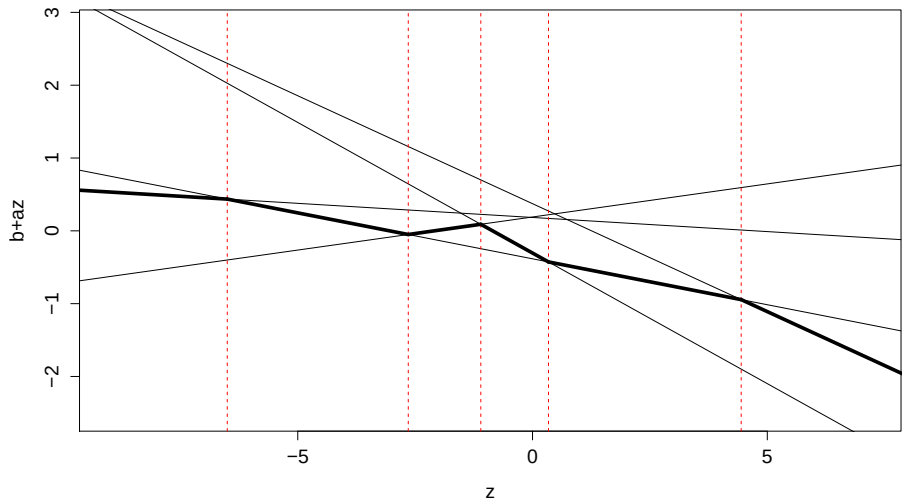
$$q_n = m_n(\mathbf{X}_{\mathrm{MC}})_{(\lfloor l\alpha \rfloor + 1)} := m_n(x_n^q).$$

- **BUT** : exprimer $q_{n+1} = m_{n+1}(x_{n+1}^q)$ en fonction du modèle à l'étape n et du nouveau couple de données (x_{n+1}, g_{n+1}).

Formule de mise à jour à un pas : Chevalier et al. (2014)

$$m_{n+1}(\mathbf{X}_{\mathrm{MC}}) = m_n(\mathbf{X}_{\mathrm{MC}}) + \frac{k_n(\mathbf{X}_{\mathrm{MC}}, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} \left(g_{n+1} - m_n(\mathbf{x}_{n+1})\right). \tag{4}$$

Une expression *explicite* de l'estimateur (1)



Proposition

Il existe une suite d'intervalles (B_i) connus telle que

$$q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}, g_{n+1}) = \sum_{i=0}^{L} m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^{q}(B_i))\mathbf{1}_{g_{n+1}\in B_i}$$

Le critère *proba*

- Par définition du quantile, on a

$$\mathbb{P}(G(X) \geq q(G(X))) = 1 - \alpha.$$

- On propose donc le critère suivant :

$$J_n^{\text{prob}} = \left| \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}(G(\mathbf{x}) \geq q_n | \mathcal{A}_n) d\mathbf{x} - (1-\alpha) \right| = \left| \Gamma_n - (1-\alpha) \right|,$$

avec $\Gamma_n = \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}\left(G(\mathbf{x}) \geq q_n | \mathcal{A}_n\right) d\mathbf{x}$.

- **PROBLEME** : J_{n+1}^{prob} dépend de g_{n+1}.

- **SOLUTION** : Sous l'hypothèse gaussienne et à l'étape n, g_{n+1} est la réalisation d'une variable aléatoire $G_{n+1} \sim \mathcal{N}(m_n(x_{n+1}), s_n^2(x_{n+1}))$ $\Rightarrow$ on *moyennise*.
- Le critère devient alors

$$J_n^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}) = \left|\mathbb{E}_{G_{n+1}}\left(\Gamma_{n+1}(x_{n+1})\right) - (1-\alpha)\right|$$

avec

$$\Gamma_{n+1}(x_{n+1}) = \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}\left(G(\mathbf{x}) \geq q_{n+1} | A_{n+1}\right) d\mathbf{x},$$

et $A_{n+1} = \mathcal{A}_{n+1} \cup (\mathbf{x}_{n+1}, G_{n+1})$.

Proposition

$$
\begin{aligned}
J_n^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}) = \Bigg| \int_{\mathbb{X}} \sum_{i=1}^{L-1} \Bigg[& \Phi_{r_i^n} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}, I_{i+1}) \right) \\
& - \Phi_{r_i^n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x})} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n(\mathbf{x}_{n+1}, I_i) \right) \\
& + \Phi_{r_i^n} \left((e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}, I_1) \right) \\
& + \Phi_{-r_i^n} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), -f_n^i \left((\mathbf{x}_{n+1}, I_L) \right) \right) \Bigg] d\mathbf{x} - (1-\alpha) \Bigg|
\end{aligned}
$$

Le critère *variance*

- q_n doit converger vers le quantile $\Rightarrow$ on veut un estimateur de plus en plus *stable*.
- La variance de $q_{n+1}|\mathcal{A}_n \cup (x_{n+1}, G_{n+1})$ est un bon indicateur de *stabilité*.
- Choix du point qui maximise cette variance pour obtenir le point dont l'évaluation a un large impact sur la valeur de l'estimateur $\Rightarrow$ Réduction de l'instabilité sur l'estimateur.

$$J_n^{\text{Var}}(\mathbf{x}_{n+1}) = \text{Var}_{G_{n+1}}(q_{n+1}|A_{n+1})$$

avec $A_{n+1} = \mathcal{A}_n \cup (\mathbf{x}_{n+1}, G_{n+1})$.

Proposition

$$J_n^{\mathrm{Var}}(\mathbf{x}_{n+1}) =$$

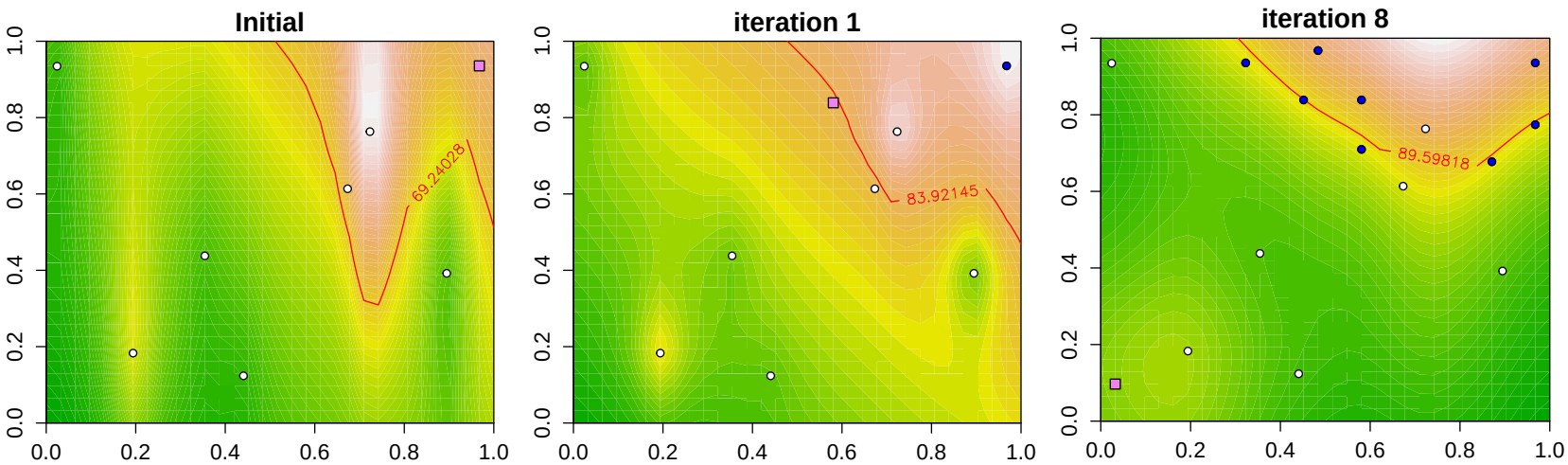
$$\sum_{i=1}^{L} \left[k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})\right]^2 V(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) P_i$$

$$+ \sum_{i=1}^{L} \left[m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i)\right]^2 (1 - P_i) P_i$$

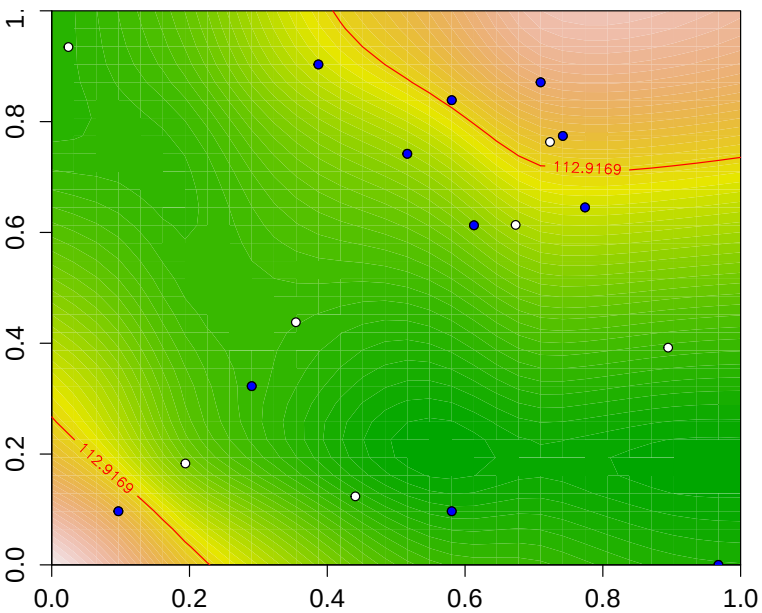
$$- 2 \sum_{i=2}^{L} \sum_{j=1}^{i-1} \left[m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i)\right] P_i$$

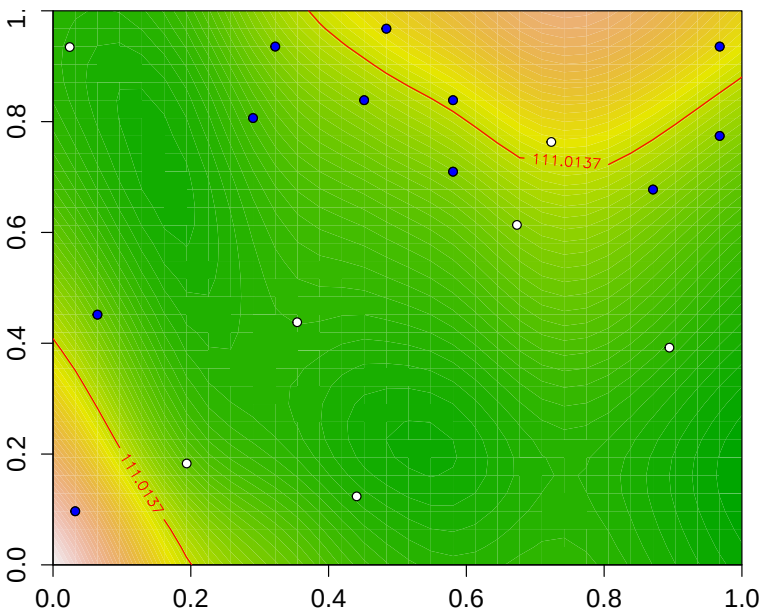
$$\left[m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{j+1}, I_j)\right] P_j,$$

Critère *variance* en dimension 2

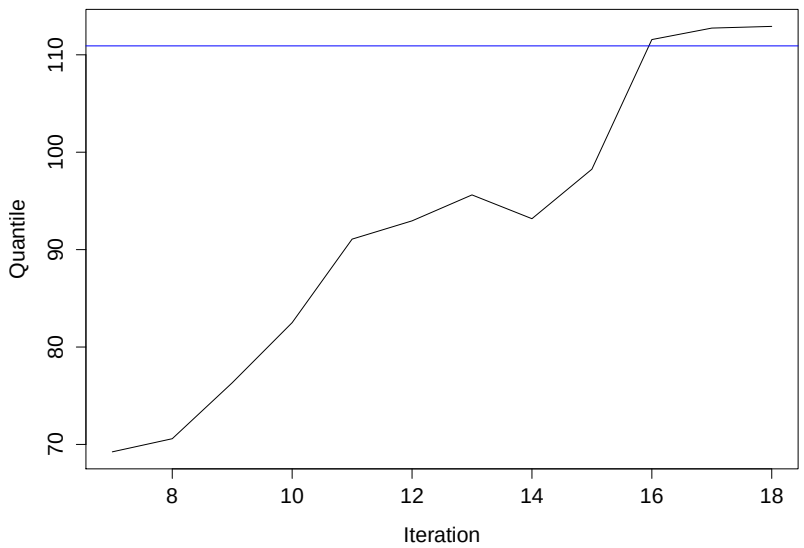


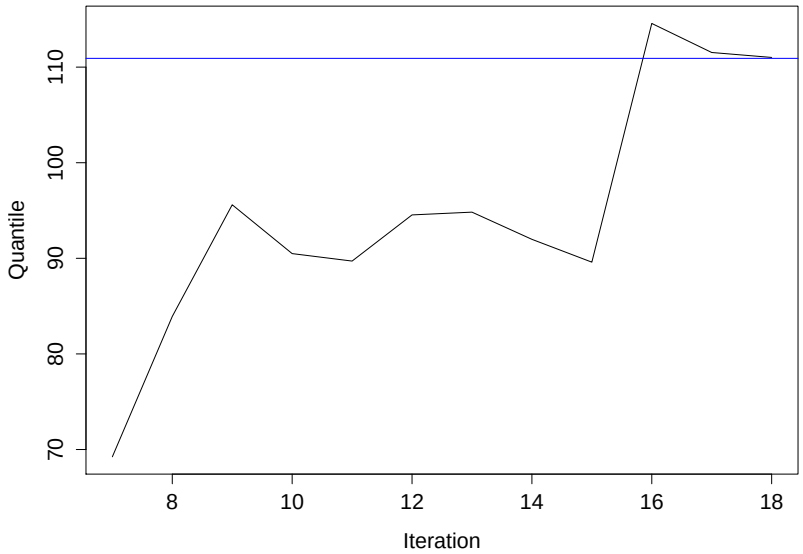
Comparaison des deux critères en dimension 2



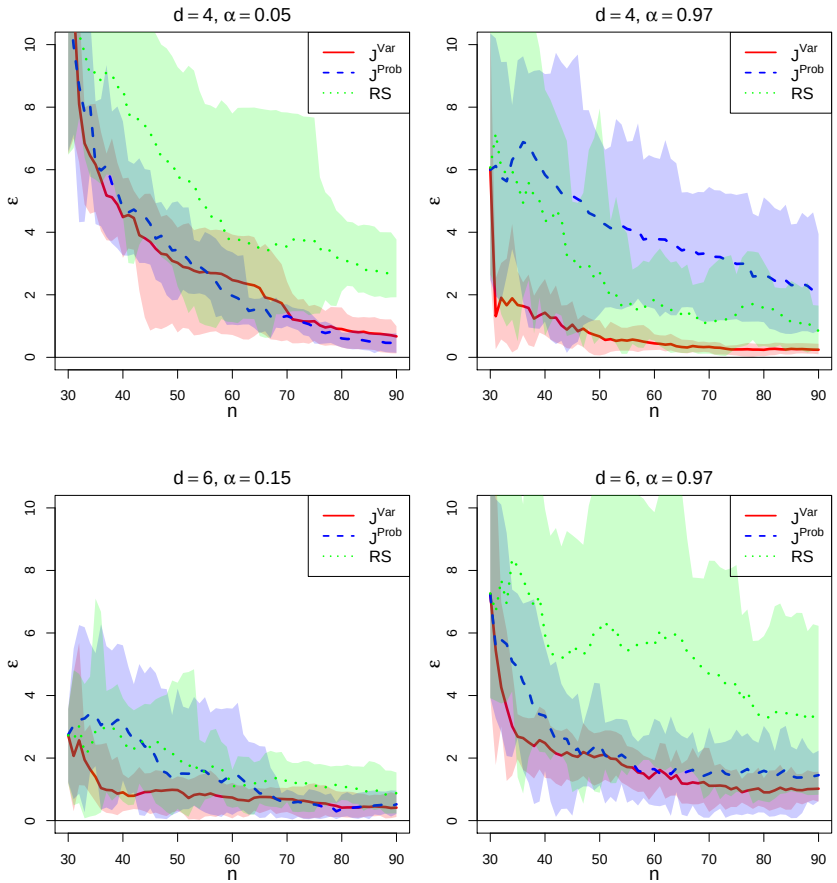


Convergence des deux estimateurs en dimension 2





En dimension supérieure




Aurélie Arnaud, Julien Bect, Mathieu Couplet, Alberto Pasanisi, and Emmanuel Vazquez.
Évaluation d'un risque d'inondation fluviale par planification séquentielle d'expériences.
In *42èmes Journées de Statistique*, Marseille, France, France, 2010.


Julien Bect, David Ginsbourger, Ling Li, Victor Picheny, and Emmanuel Vazquez.
Sequential design of computer experiments for the estimation of a probability of failure.
Statistics and Computing, 22(3) :773–793, 2012.


Clément Chevalier, David Ginsbourger, and Xavier Emery.
Corrected kriging update formulae for batch-sequential data assimilation.

In *Mathematics of Planet Earth*, pages 119–122. Springer, 2014.

Donald Geman and Bruno Jedynak.
An active testing model for tracking roads in satellite images.
Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on, 18(1) :1–14, 1996.

Marjorie Jala, Céline Lévy-Leduc, Eric Moulines, Emmanuelle Conil, and Joe Wiart.
Sequential design of computer experiments for parameter estimation with application to numerical dosimetry.
In *Signal Processing Conference (EUSIPCO), 2012 Proceedings of the 20th European*, pages 909–913. IEEE, 2012.