New Perspectives for Sensitivity Analysis

Sebastien Da Veiga – Safran Tech

Mexico – GDR Mascot Num 11/24/2016

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

OUTLINE

➔ Context

➔ Generalized GSA

- Distances between probability distributions
- RKHS embedding
- Orthogonal decompositions

➔ Conclusion & Perspectives

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Sensitivity Analysis

- Goal : identify and rank the input parameters according to their impact on the output of a computer code

- Why ?
  - Reduce the output uncertainty efficiently by reducing the uncertainty of the main contributors
  - Improve the knowledge of the physical phenomenon,
  - Simplify the model

- Notations

Computer code

$$Y = \eta(X_1, \ldots, X_d)$$

Output

Input parameters

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Two points of view

- Local Sensitivity: studies the behavior of the output locally around a nominal value of the inputs

$$S_i = \frac{\sigma^2_{X_i}}{\mathrm{Var}(Y)} \left(\frac{\partial \eta(X)}{\partial X_i} |_{X=X_0} \right)^2$$

  - *Easy to compute and apprehend*
  - *But local approach, turns global only if the model is linear*

- Global sensitivity: all input parameters vary in their uncertain domain and we analyze the output variations

There are links between the viewpoints when local sensitivity is repeated (DGSM, Lamboni et al. 2013)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Global Sensivity Analysis (GSA) – 2 families of methods

- Screening methods
  - Standard DOEs
  - Sequential bifurcation, …
  - Morris

$$n \approx d/2 - 10d$$

- Quantitative methods based on a variance decomposition
  - Linear regression, SRC, …
  - Sobol indices

$$n \approx 2d - 10^4 d$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

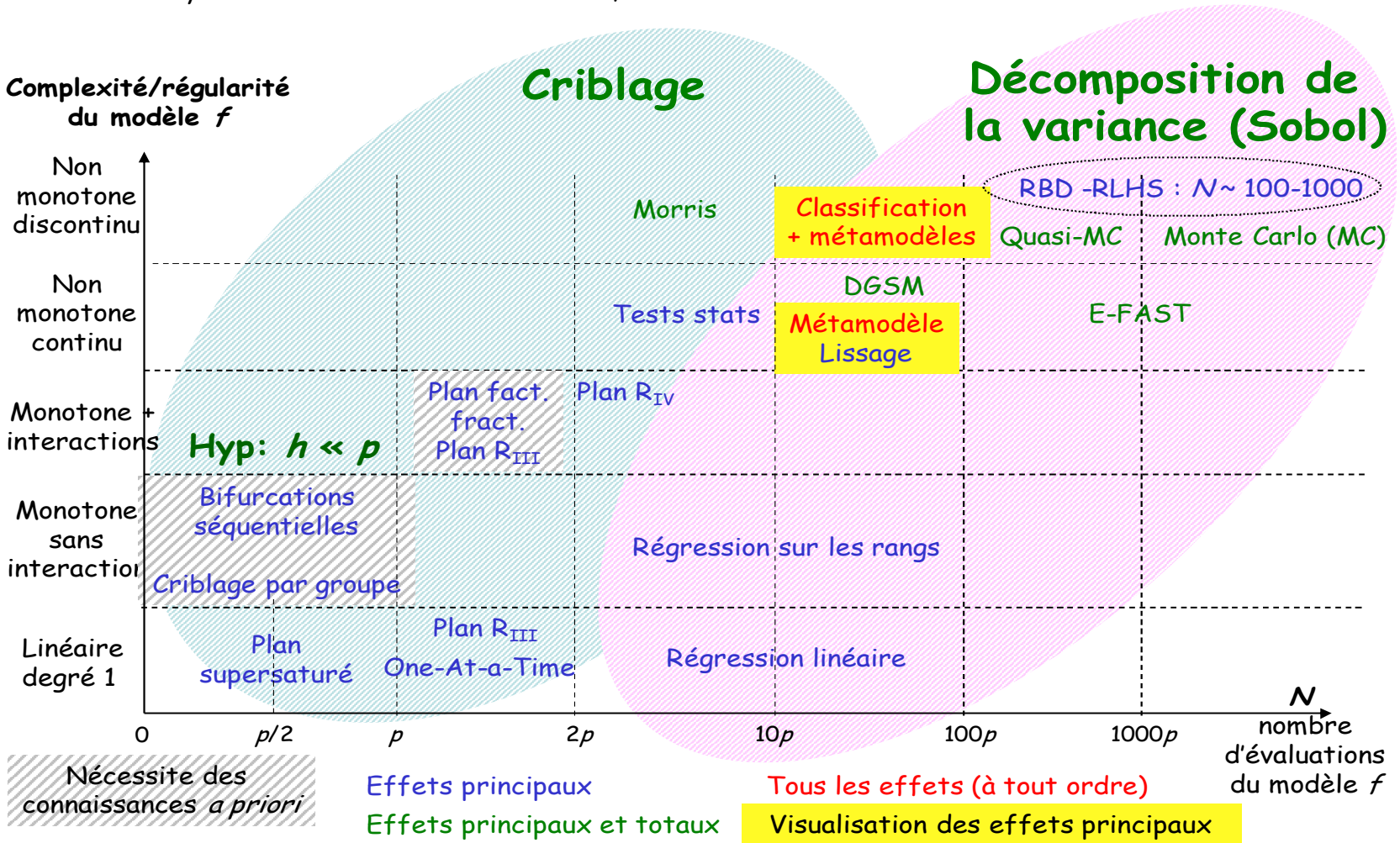
SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

Classification des méthodes d'analyses de sensibilité

p = nombre de variables d'entrée , *h* = nombre de variables influentes

Iooss & Lemaître 2015



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ GSA – Focus on Sobol indices

- Sobol-Hoeffding decomposition for independent input parameters

$$\eta(X) = \eta_0 + \sum_{i=1}^{d} \eta_i(X_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} \eta_{i,j}(X_i, X_j) + \ldots + \eta_{1,\ldots,d}(X_1, \ldots, X_d)$$

  - Functions are centered and orthogonal
  - Formulas with conditional expectations:

$$\begin{aligned}
\eta_0 &= \mathbb{E}(Y) \\
\eta_i(X_i) &= \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y) \\
\eta_{i,j}(X_i, X_j) &= \mathbb{E}(Y|X_i, X_j) - \mathbb{E}(Y|X_i) - \mathbb{E}(Y|X_j) + \mathbb{E}(Y) \\
&\ldots
\end{aligned}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ GSA – Focus on Sobol indices

- By orthogonality

$$\mathrm{Var}(\eta(X)) = \sum_{i=1}^{d} \mathrm{Var}(\eta_i(X_i)) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} \mathrm{Var}(\eta_{i,j}(X_i, X_j)) + \ldots + \mathrm{Var}(\eta_{1,\ldots,d}(X_1, \ldots, X_d))$$

- The total variance is decomposed into pieces involving main effects, 2nd order interactions, and so on
- => Possibility to define the sensitivity index of a groupt of input parameters

$$S_I(X_I) = \frac{\mathrm{Var}(\eta_I(X_I))}{\mathrm{Var}(\eta(X))}$$

$$S_i(X_i) = \frac{\mathrm{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))}{\mathrm{Var}(Y)}$$ Main effect

$$S_i^T(X_i) = \sum_{I \supseteq i} S_I$$ Total effect

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Limitations

- Variance decomposition is just a particular (and limited) analysis of the output variation
- The numerical code is expensive to evaluate
  - Usually rely on surrogate model to estimate Sobol indices
- The number of input parameters may be large (100 – 1000)
  - In practive, a first screening step is necessary
- Inputs & outputs may not be scalars (curves, …)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Limitations

Take Home Message I
Generalized GSA

- Variance decomposition is just a particular (and limited) analysis of the output variation
- The numerical code is expensive to evaluate
  - Usually rely on surrogate model to estimate Sobol indices
- The number of input parameters may be large (100 – 1000)
  - In practive, a first screening step is necessary
- Inputs & outputs may not be scalars (curves, …)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Limitations

Take Home Message I
Generalized GSA

- Variance decomposition is just a particular (and limited) analysis of the output variation

- The numerical code is expensive to evaluate
  - Usually rely on surrogate model to estimate Sobol indices

- The number of input parameters may be large (100 – 1000)
  - In practive, a first screening step is necessary

- Inputs & outputs may not be scalars (curves, …)

Take Home Message II
Links between generalized GSA and feature selection …

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONTEXT

➔ Limitations

Take Home Message I
Generalized GSA

- Variance decomposition is just a particular (and limited) analysis of the output variation

- The numerical code is expensive to evaluate
  - Usually rely on surrogate model to estimate Sobol indices

- The number of input parameters may be large (100 – 1000)
  - In practive, a first screening step is necessary

- Inputs & outputs may not be scalars (curves, …)

Take Home Message II
Links between generalized GSA and feature selection …

… which can accommodate structured objects

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

OUTLINE

➔ Context

➔ **Generalized GSA**

- Distances between probability distributions
- RKHS embedding
- Orthogonal decompositions

➔ Conclusion & Perspectives

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Going beyond the variance decomposition

- « Jitter » the input probability distributions (Lemaître et al. 2015)
- Indices based on contrast functions (Fort et al. 2014)

$$S_i^{\psi} = \mathbb{E}\psi(Y;\theta^*) - \mathbb{E}_{(X_i,Y)}\psi(Y;\theta_i(X_i))$$

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} \mathbb{E}\psi(Y;\theta)$$

$$\theta_i(x) = \arg\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y;\theta)|X_i = x)$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Going beyond the variance decomposition

- « Jitter » the input probability distributions (Lemaître et al. 2015)
- Indices based on contrast functions (Fort et al. 2014)

$$S_i^{\psi} = \mathbb{E}\psi(Y;\theta^*) - \mathbb{E}_{(X_i,Y)}\psi(Y;\theta_i(X_i))$$

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} \mathbb{E}\psi(Y;\theta)$$

$$\theta_i(x) = \arg\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y;\theta)|X_i = x)$$

- Quantify the impact of an input parameter on the **probability distribution of the output**

$$S_i^{TV} = \int |p_Y(y) - p_{Y|X_i=x}(y)| p_{X_i}(x) dx dy$$

Borgonovo 2007

$$S_i^{KL} = \int p_{Y|X_i=x}(y) \ln\left(\frac{p_{Y|X_i=x}(y)}{p_Y(y)}\right) p_{X_i}(x) dx dy$$

Kraskov et al. 2001

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ General framework for distributional indices

- From a broad perspective, the impact of an input parameter may be defined through the choice of a similarity measure between probability distributions

$$S_i = \mathbb{E}_{X_i}\left(d(P_Y, P_{Y|X_i})\right)$$

Baucells and Borgonovo 2013
D. 2014

  - If the input probability distribution and the conditional one are « close », the input parameter has little influence

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ General framework for distributional indices

- From a broad perspective, the impact of an input parameter may be defined through the choice of a similarity measure between probability distributions

$$S_i = \mathbb{E}_{X_i}\left(d(P_Y, P_{Y|X_i})\right)$$

Baucells and Borgonovo 2013
D. 2014

  - If the input probability distribution and the conditional one are « close », the input parameter has little influence

- Toy example

$$Y = \sin(X_1) + 5\sin^2(X_2) + 0.1X_3^4\sin(X_1)$$

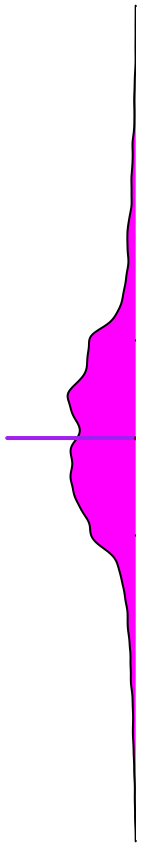
$$X_1, X_2, X_3, X_4 \sim U\left(-\pi, \pi\right)$$

Ishigami function with dummy variable

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

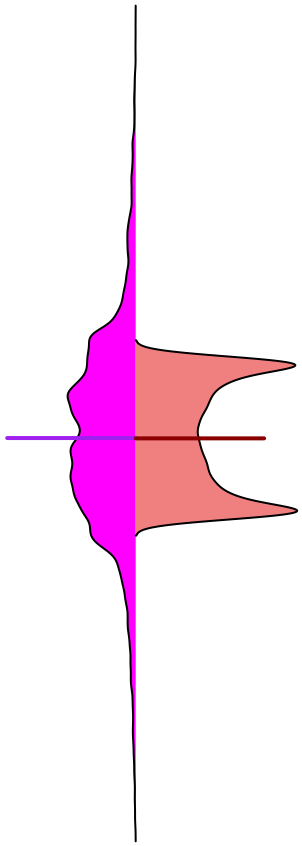
GENERALIZED GSA



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

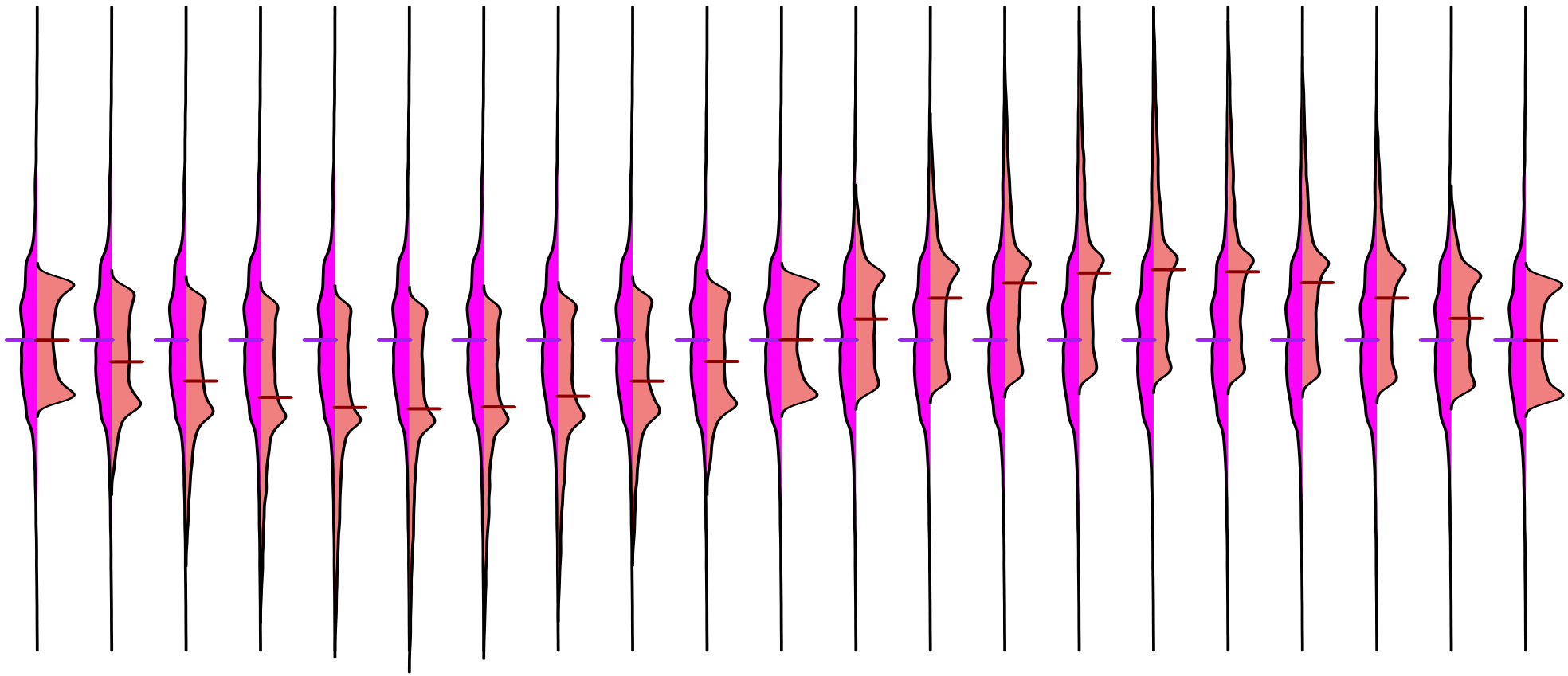
GENERALIZED GSA



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

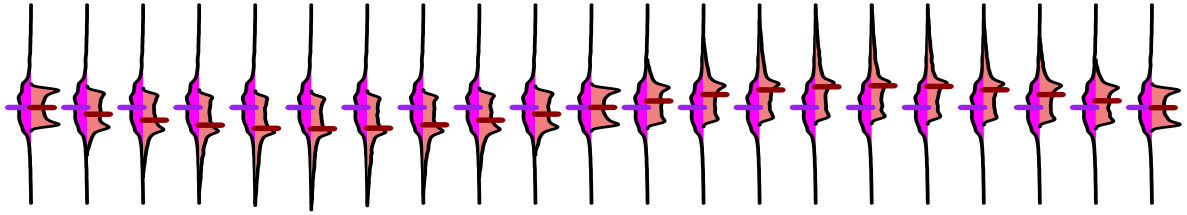
GENERALIZED GSA



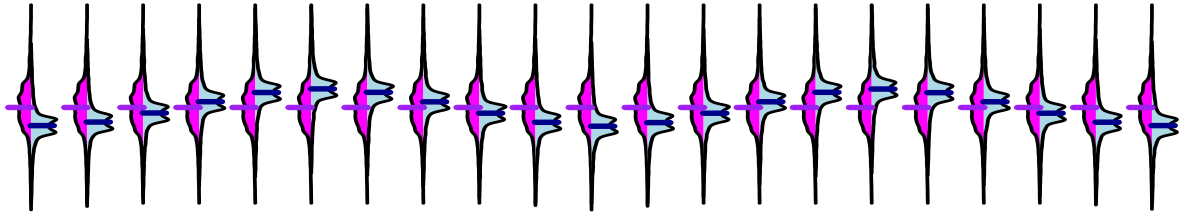
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

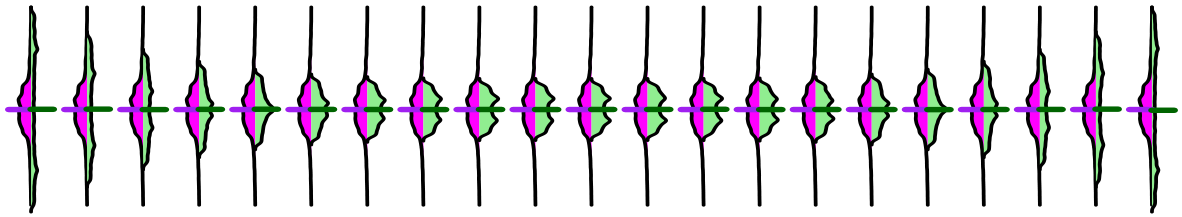
X1 fixed



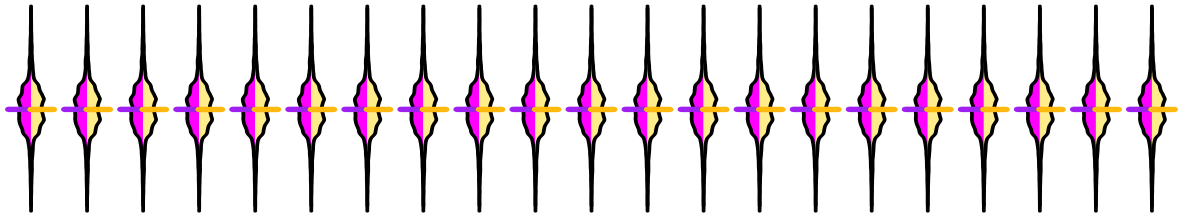
X2 fixed



X3 fixed



X4 fixed



What do you think ?

crite de Safran.

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

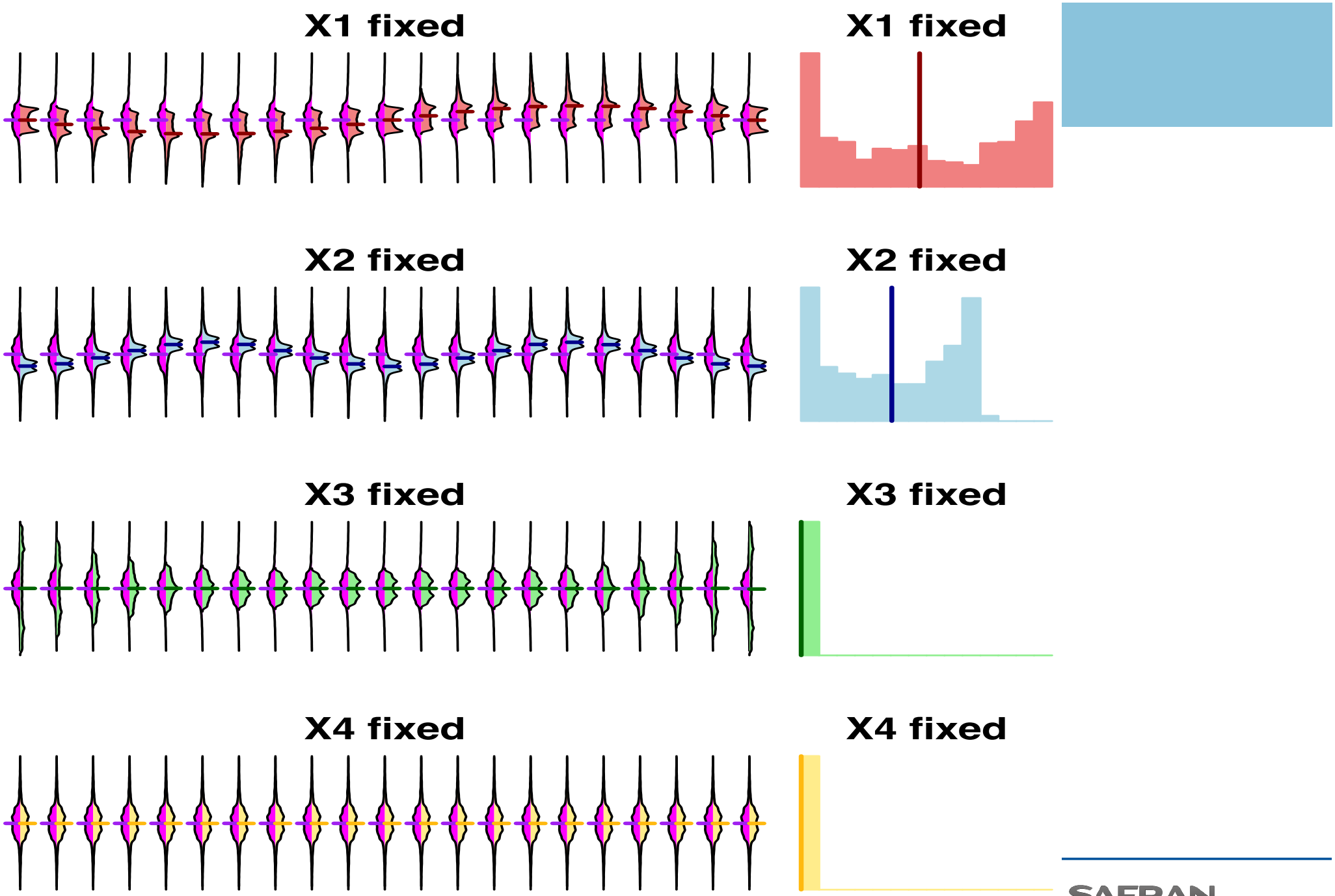
➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$ ➔ Sobol !

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY



SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$ ➔ Sobol !

- The f-divergence family

$$d_f(P_Y || P_{Y|X_i}) = \int f\left(\frac{p_Y(y)}{p_{Y|X_i}(y)}\right) p_{Y|X_i}(y) dy$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$ ➔ Sobol !

- The f-divergence family

$$d_f(P_Y || P_{Y|X_i}) = \int f\left(\frac{p_Y(y)}{p_{Y|X_i}(y)}\right) p_{Y|X_i}(y) dy$$

$$S_i^f = \int f\left(\frac{p_Y(y) p_{X_i}(x)}{p_{X_i,Y}(x,y)}\right) p_{X_i,Y}(x,y) dx dy$$ D. 2014

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$ ➔ Sobol !

- The f-divergence family

$$d_f(P_Y || P_{Y|X_i}) = \int f\left(\frac{p_Y(y)}{p_{Y|X_i}(y)}\right) p_{Y|X_i}(y) dy$$

  - Includes as particular cases
-

$$S_i^{TV} = \int |p_Y(y) - p_{Y|X_i=x}(y)| p_{X_i}(x) dx dy$$

Borgonovo 2007

$$S_i^{KL} = \int p_{Y|X_i=x}(y) \ln\left(\frac{p_{Y|X_i=x}(y)}{p_Y(y)}\right) p_{X_i}(x) dx dy$$

Kraskov et al. 2001

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ How can we compare probability distributions ?

- The basics
  - Compare their means

$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = (\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(Y|X_i))^2$$ ➔ Sobol !

- The f-divergence family

$$d_f(P_Y || P_{Y|X_i}) = \int f\left(\frac{p_Y(y)}{p_{Y|X_i}(y)}\right) p_{Y|X_i}(y) dy$$

- Maximum Mean Discrepancy (MMD) or Integral Probability Metrics (IPMs)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Maximum Mean Discrepancy

$$\mathrm{MMD}(P, Q; F) := \sup_{f \in F} \left[\mathbb{E}_P f(x) - \mathbb{E}_Q f(x) \right]$$

➔ The distance is zero iif the probability distributions are equal

- F = bounded continuous functions (Dudley metric)
- F = functions with bounded variations (Kolmogorov metric)
- F = Lipschitz bounded functions (Earth mover's distance – Wasserstein metric)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Distributional indices: advantages

- Account for the whole effect of a parameter on the output distribution and not only on the mean
- Density-based, which means
  - Many methods and codes for estimation
  - As we have seen, several distances can be investigated without any additional cost

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Distributional indices: advantages

- Account for the whole effect of a parameter on the output distribution and not only on the mean
- Density-based, which means
  - Many methods and codes for estimation
  - As we have seen, several distances can be investigated without any additional cost

➔ Limitations

- Density estimation suffers from the curse of dimensionality
  - If we want to consider outputs which are not scalars, this will be a bottleneck
  - Impossible to compute a total index equivalent in this setting
    - Even low order interactions
- Estimation bias

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

GENERALIZED GSA

➔ Distributional indices: advantages

- Account for the whole effect of a parameter on the output distribution and not only on the mean
- Density-based, which means
  - Many methods and codes for estimation
  - As we have seen, several distances can be investigated without any additional cost

➔ Limitations

- Density estimation suffers from the curse of dimensionality
  - If we want to consider outputs which are not scalars, this will be a bottleneck
  - Impossible to compute a total index equivalent in this setting
    - Even low order interactions
- Estimation bias
- **No decomposition into main effects, interactions, …**
  - Interpretation is problematic

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

GENERALIZED GSA

➔ Distributional indices: advantages

- Account for the whole effect of a parameter on the output distribution and not only on the mean
- Density-based, which means
  - Many methods and codes for estimation
  - As we have seen, several distances can be investigated without any additional cost

➔ Limitations

- Density estimation suffers from the curse of dimensionality
  - If we want to consider outputs which are not scalars, this will be a bottleneck
  - Impossible to compute a total index equivalent in this setting
    - Even low order interactions
- Estimation bias
- **No decomposition into main effects, interactions, …**
  - Interpretation is problematic
- A possible point of view: RKHS embedding of probability distributions

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

OUTLINE

➔ Context

➔ **Generalized GSA**

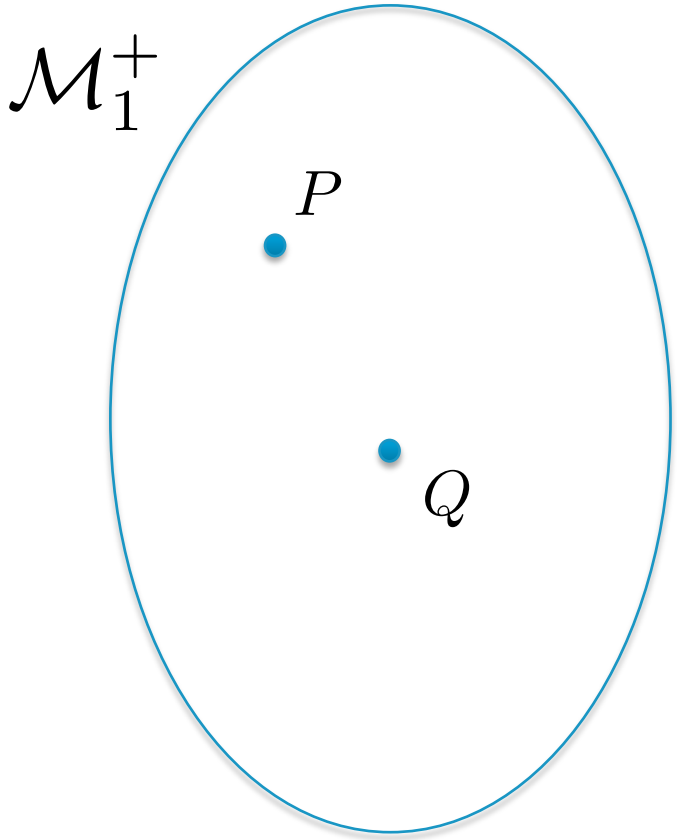
- Distances between probability distributions
- RKHS embedding
- Orthogonal decompositions

➔ Conclusion & Perspectives

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

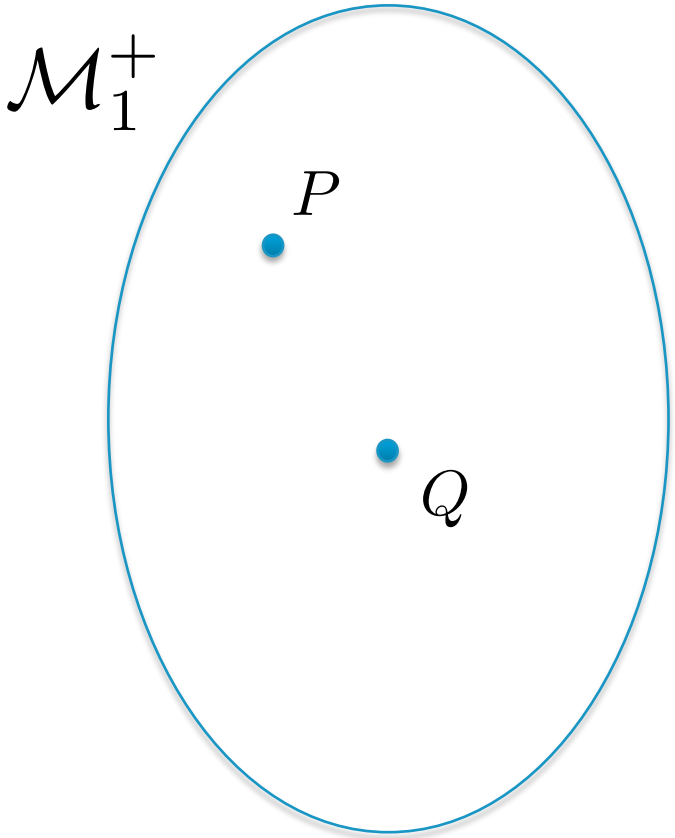
SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

RKHS EMBEDDING



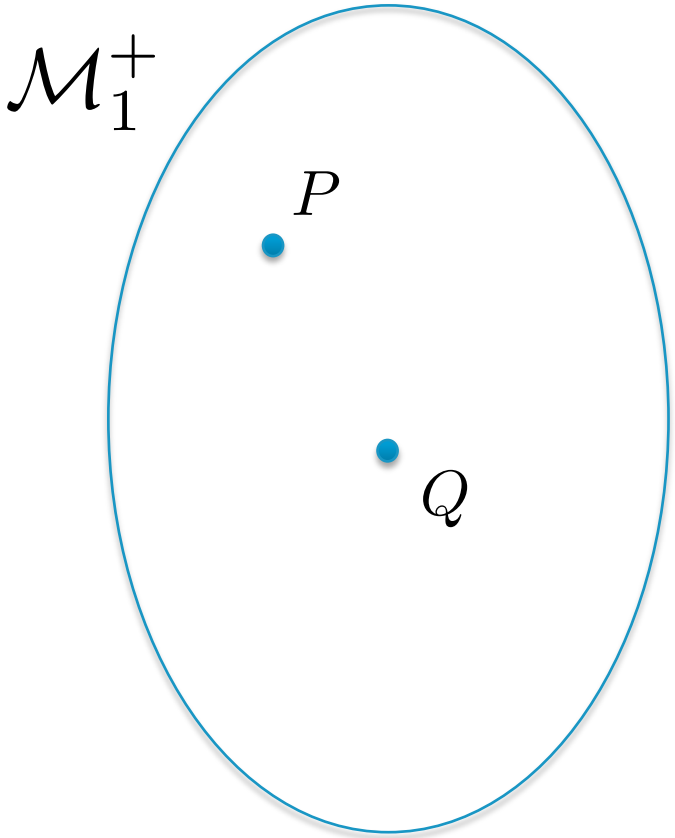
$$d(P,Q) = \sup_{A\in\Sigma} |P(A) - Q(A)|$$

TV $$= \frac{1}{2}\int_\Omega |f_P - f_Q| d\mu$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



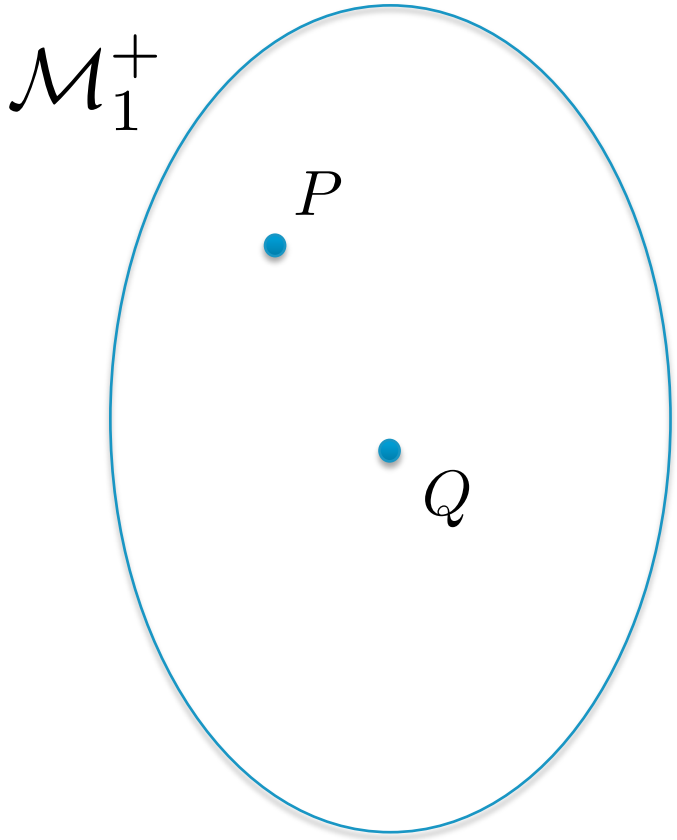
$$d(P,Q) = \int_\Omega f_P log(f_P/f_Q) d\mu$$

KL

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

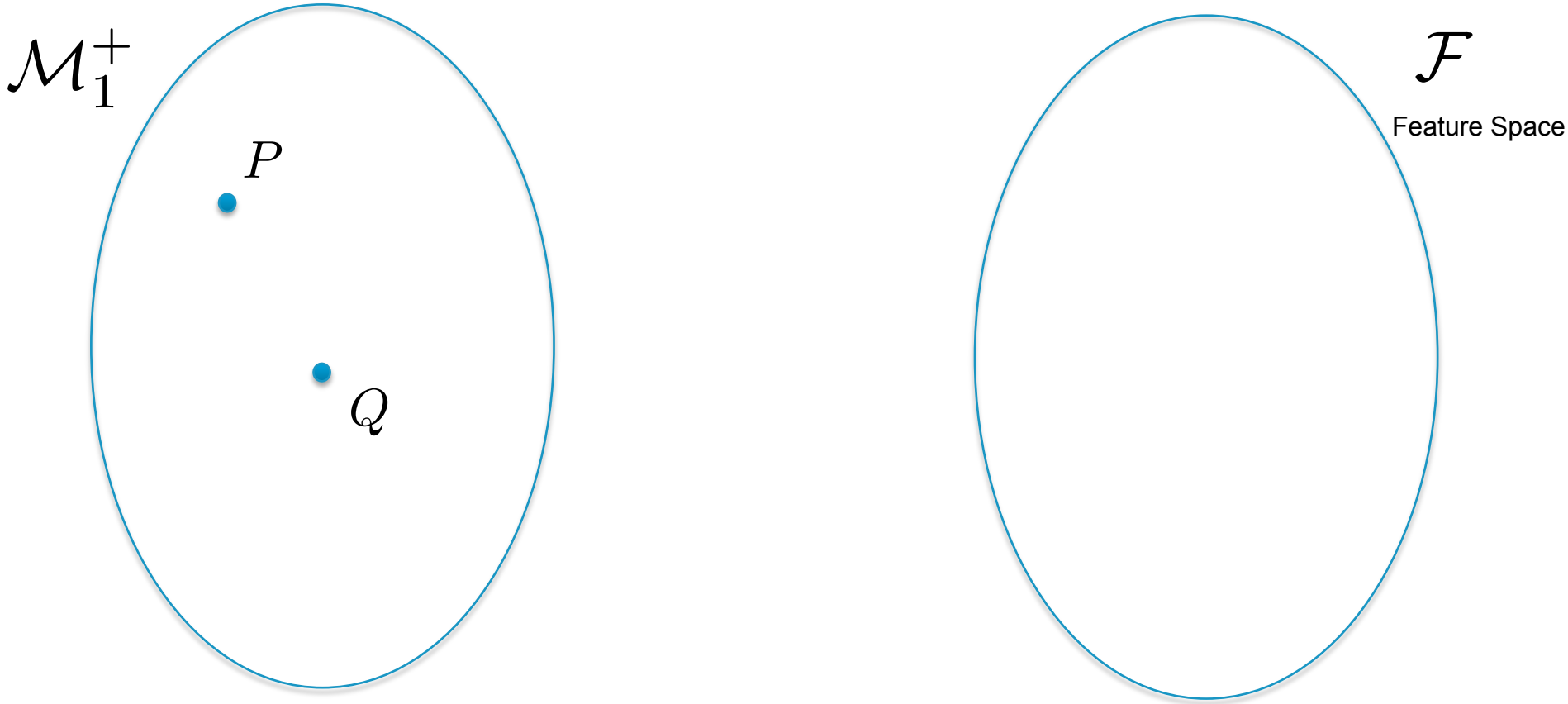


Other point of view: represent a probability distribution with some features

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

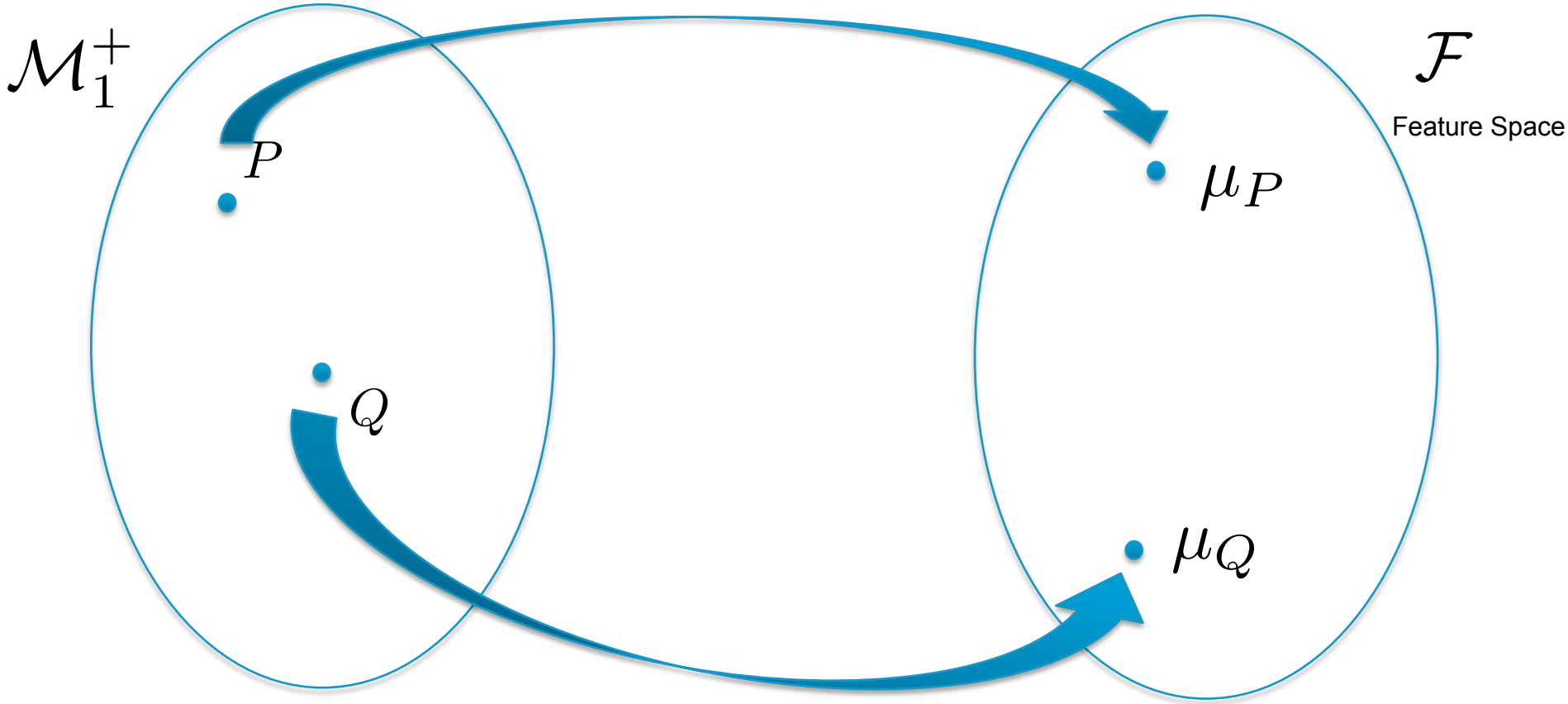


Other point of view: represent a probability distribution with some features

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

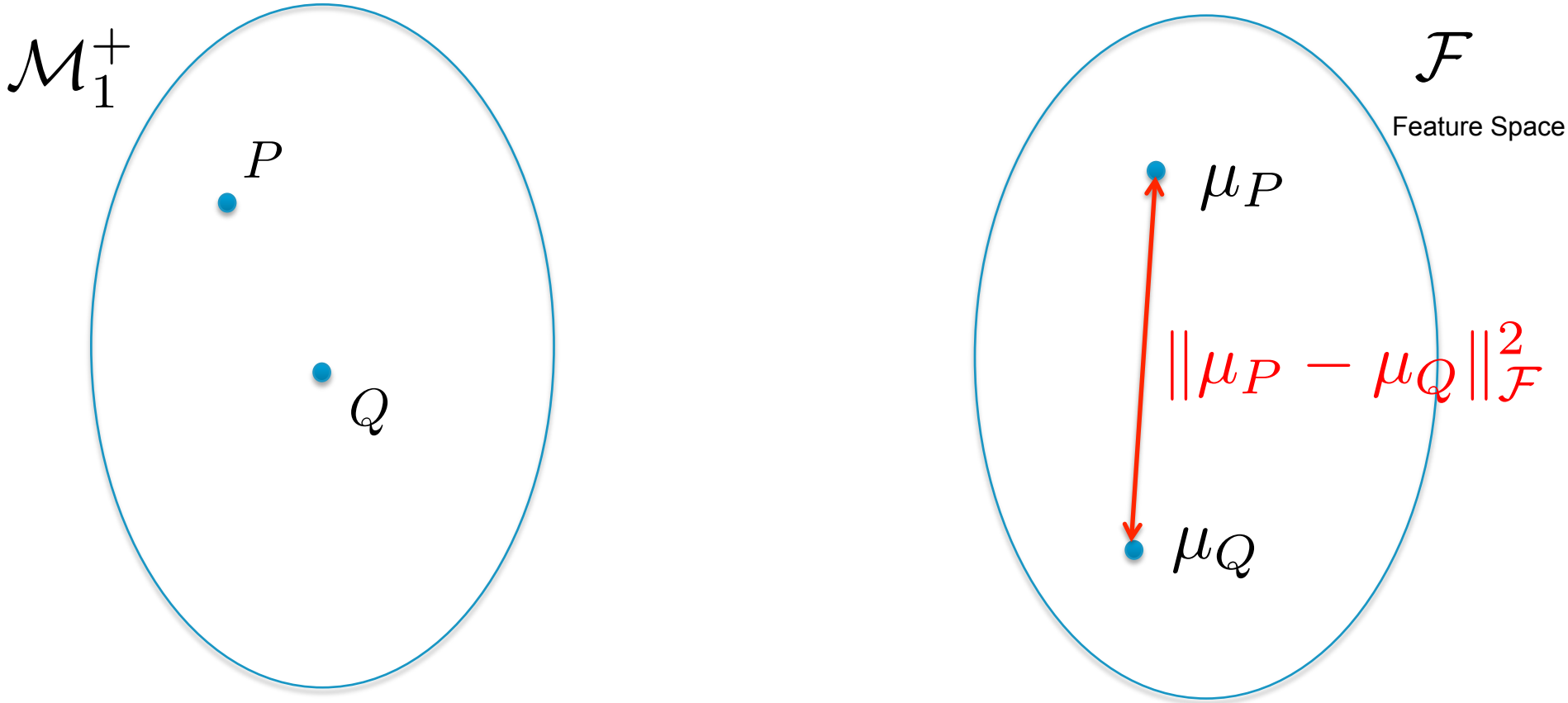


Other point of view: represent a probability distribution with some features

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

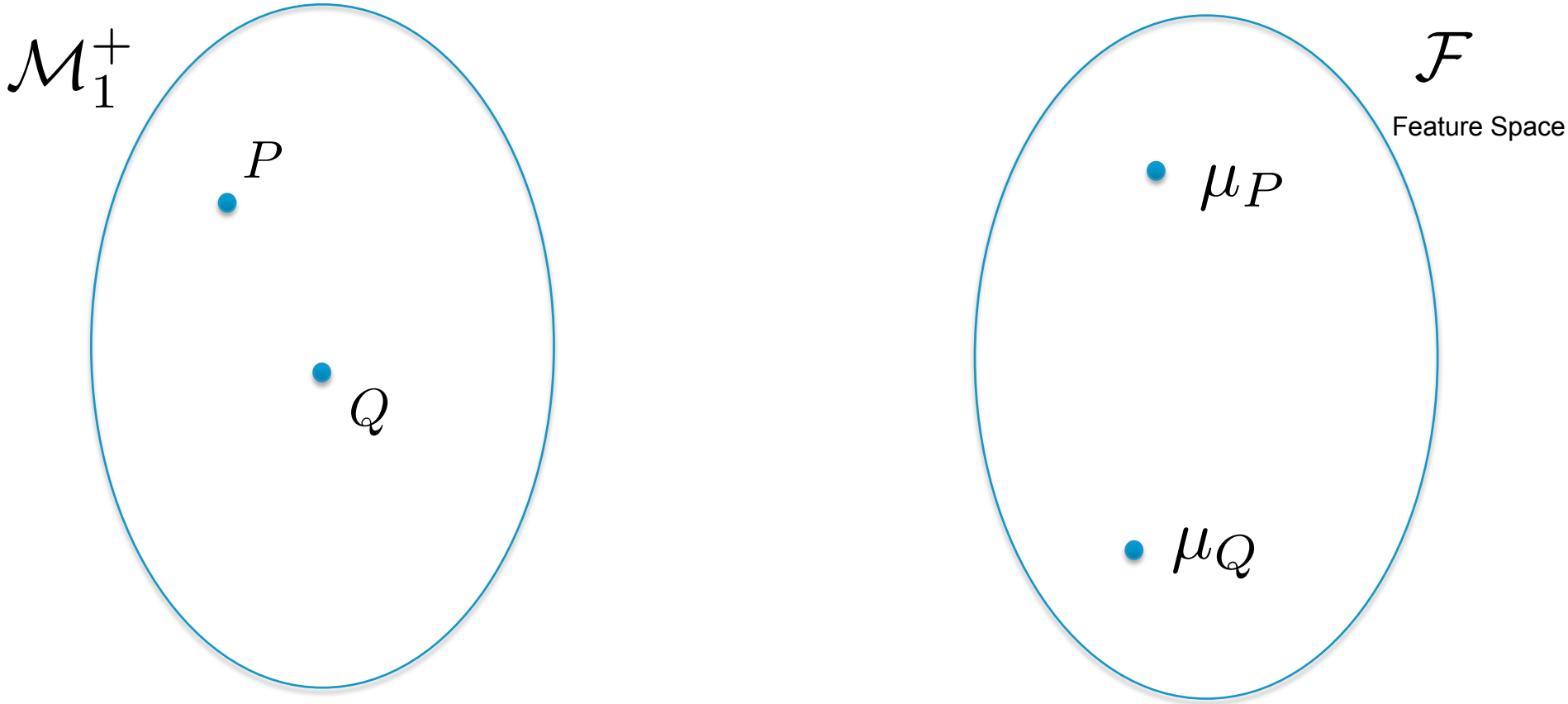


The dissimilarity between probability distributions is measured through the distance between their representation in the feature space

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

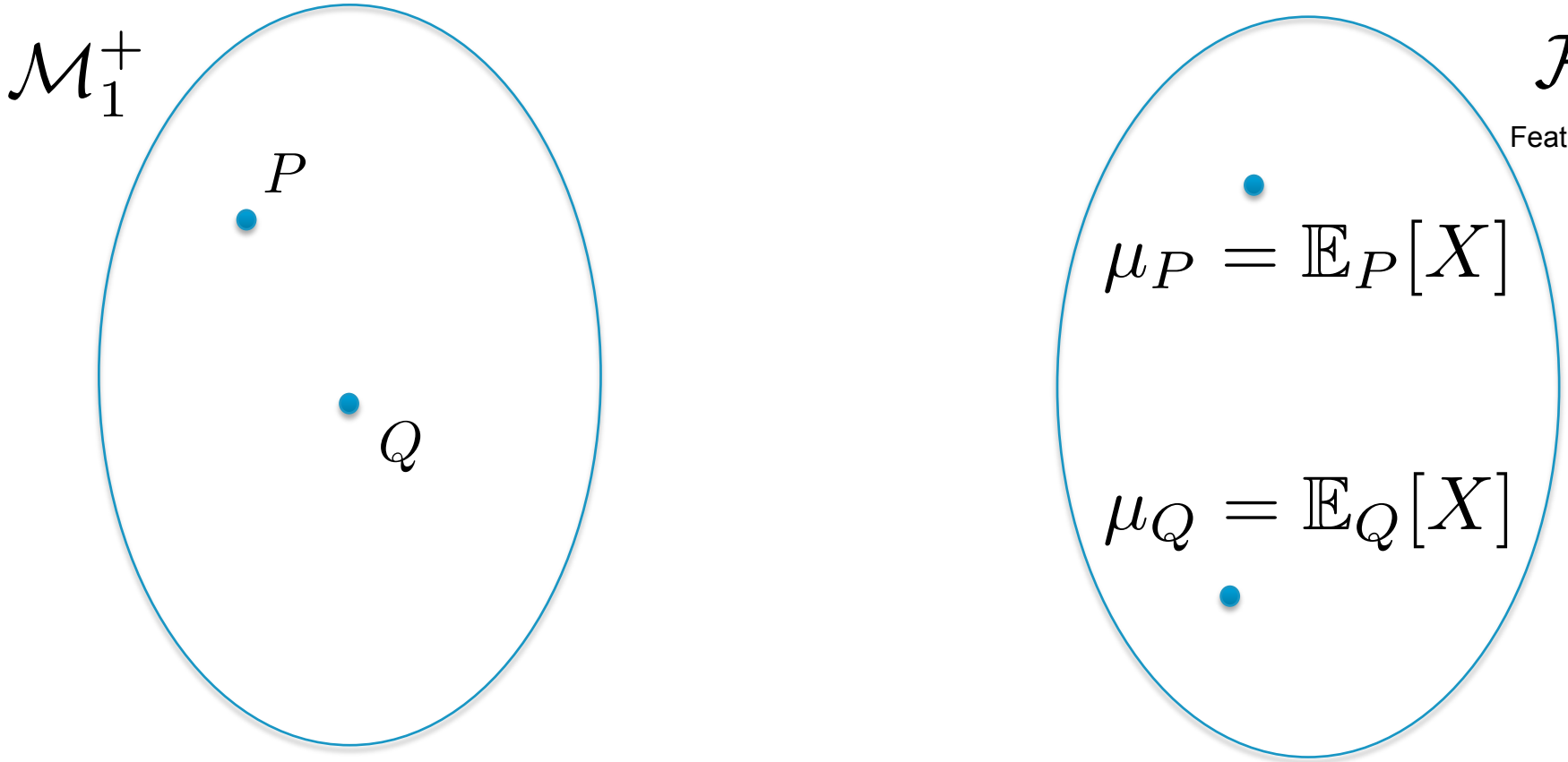


Question: which feature ?

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

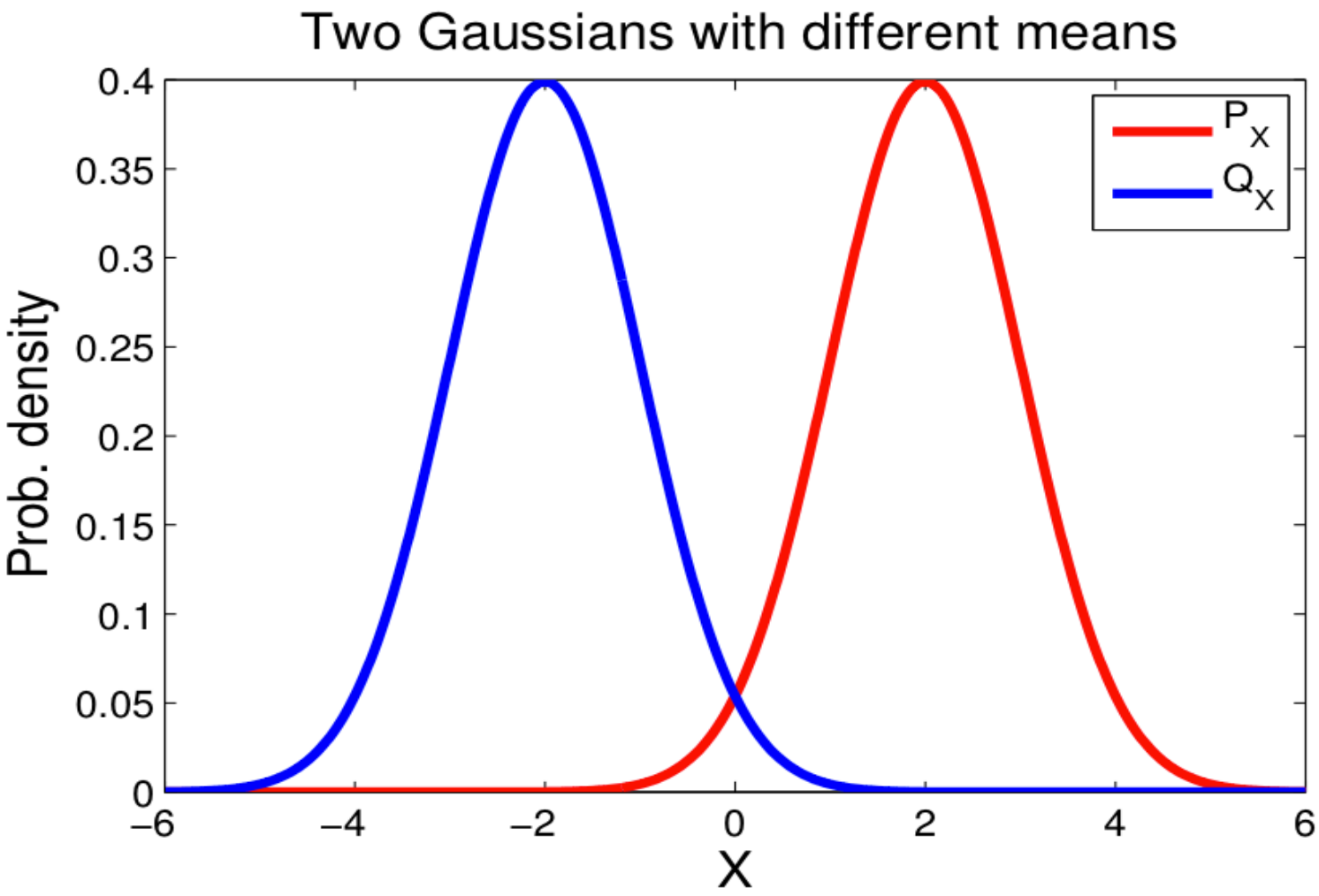


Dissimilarity measured only through the means

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



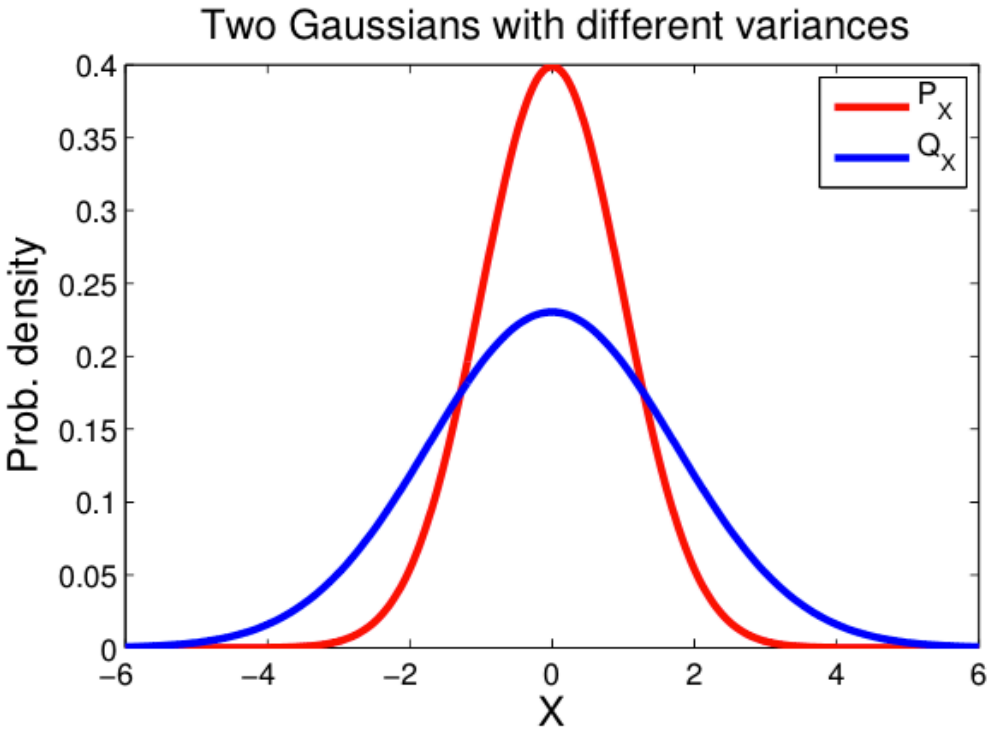
OK ✓

Gretton 2012

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



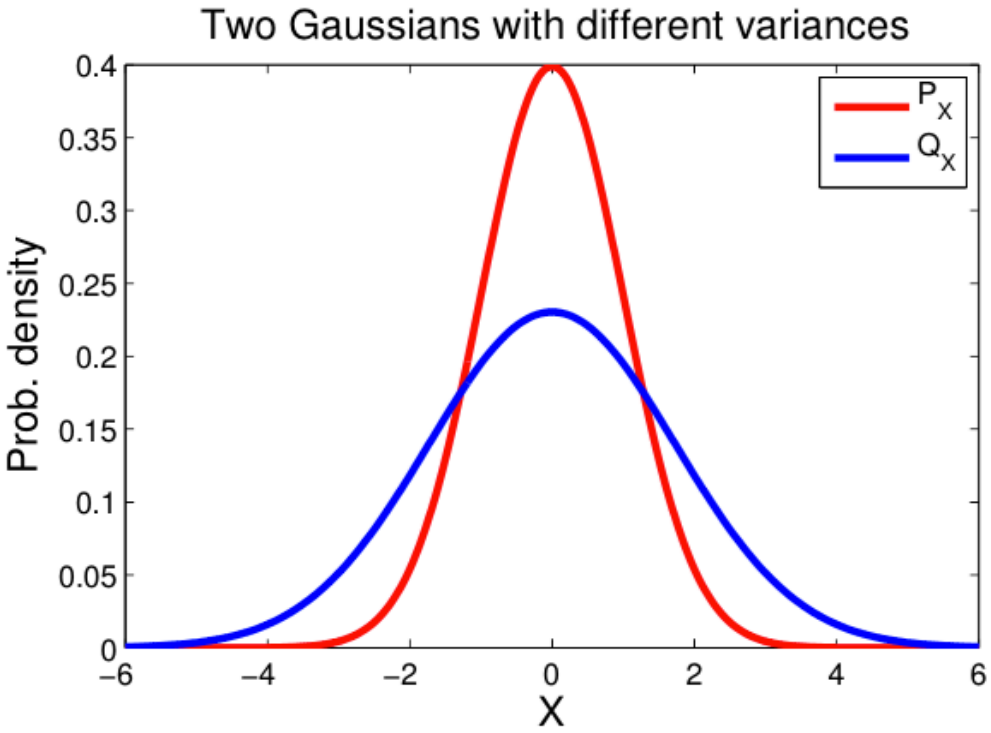
NOK

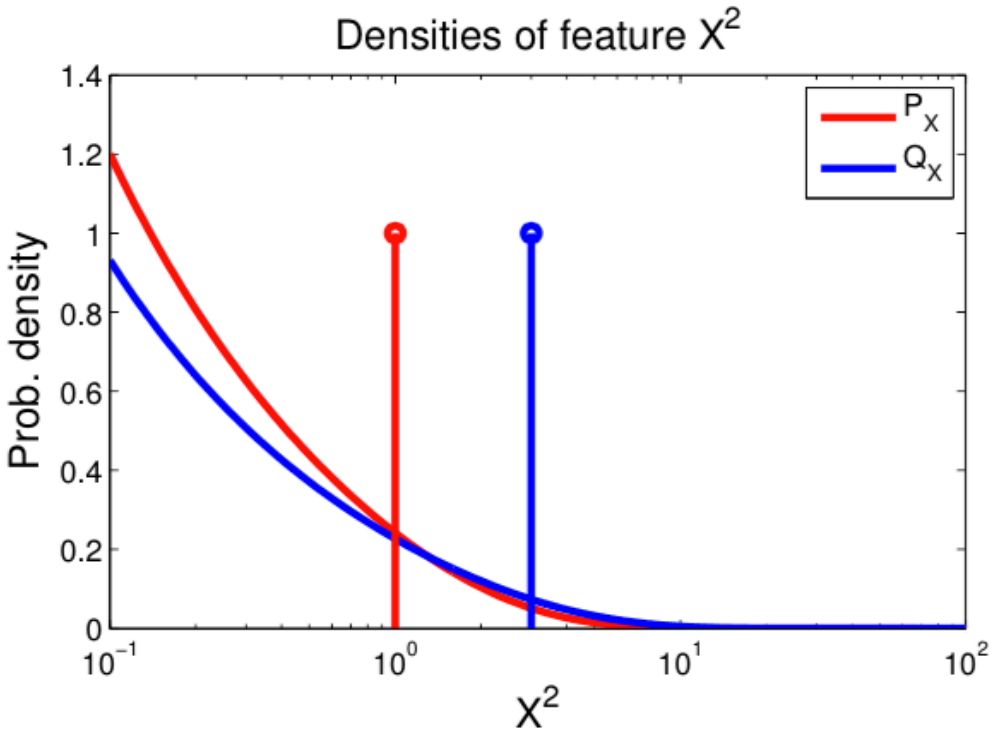
✗

Gretton 2012

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

RKHS EMBEDDING





NOK

✗

OK

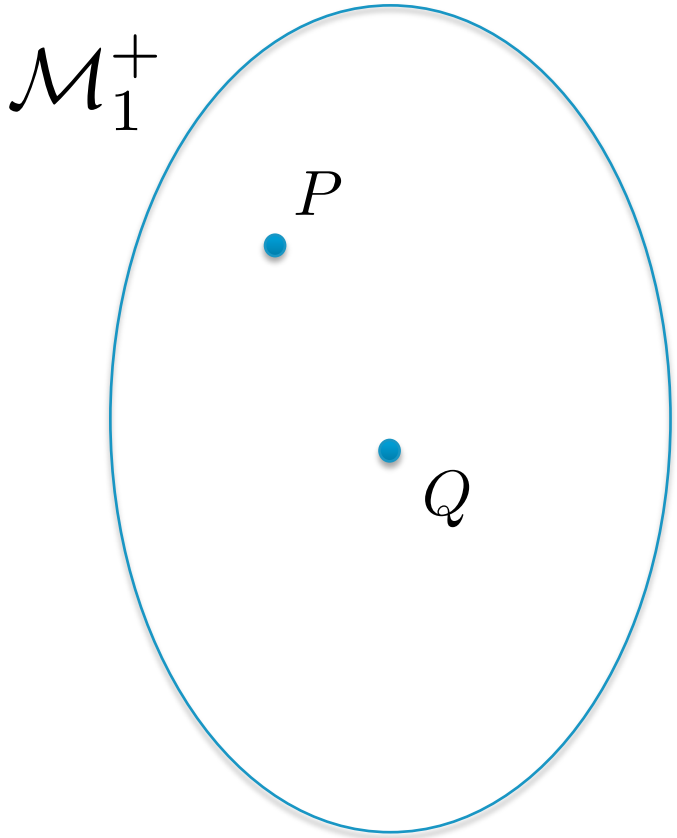
✓

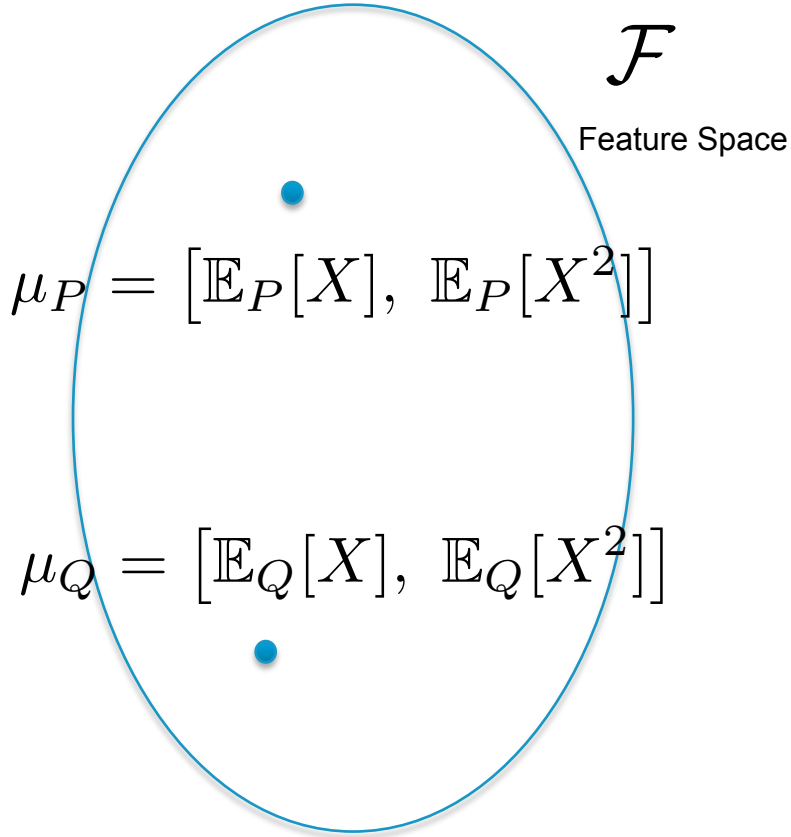
Gretton 2012

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



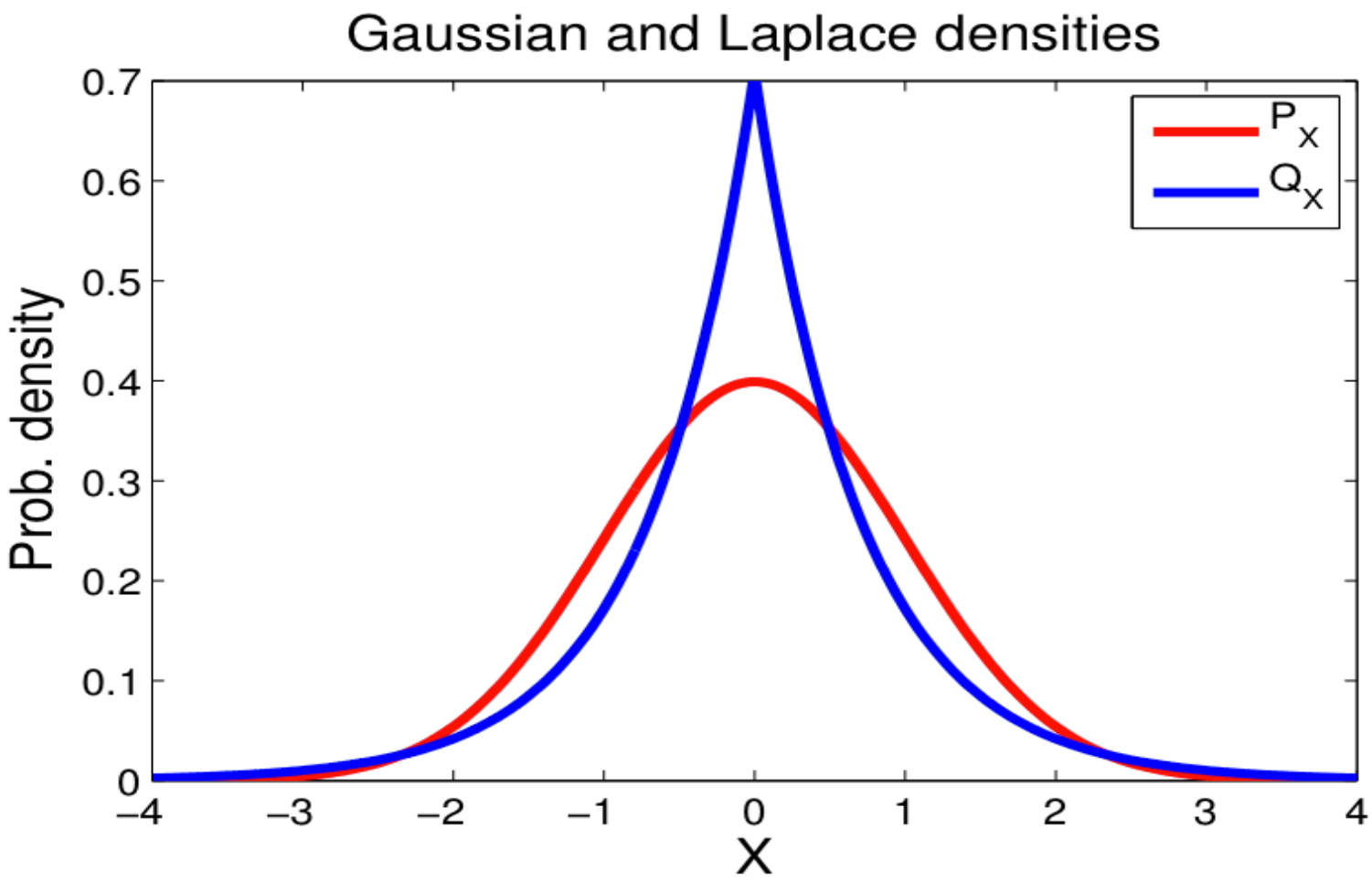


Dissimilarity measured only through means & variances

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



NOK

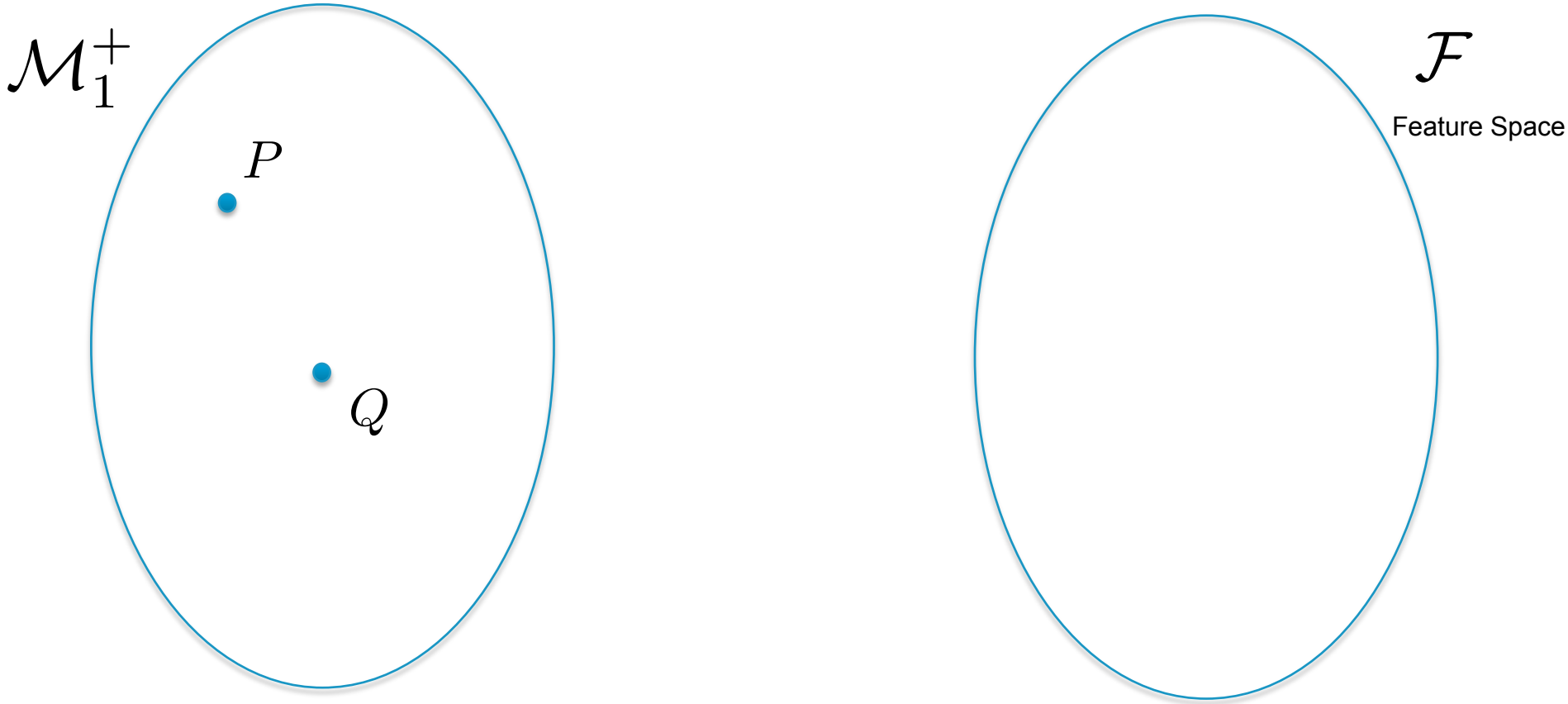
✗

Gretton 2012

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



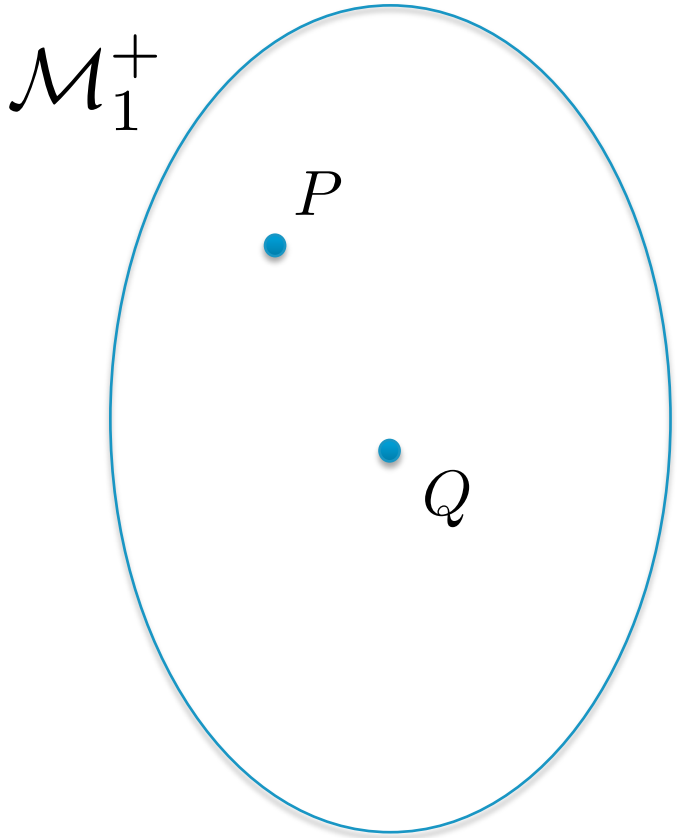
General setting: take a feature map

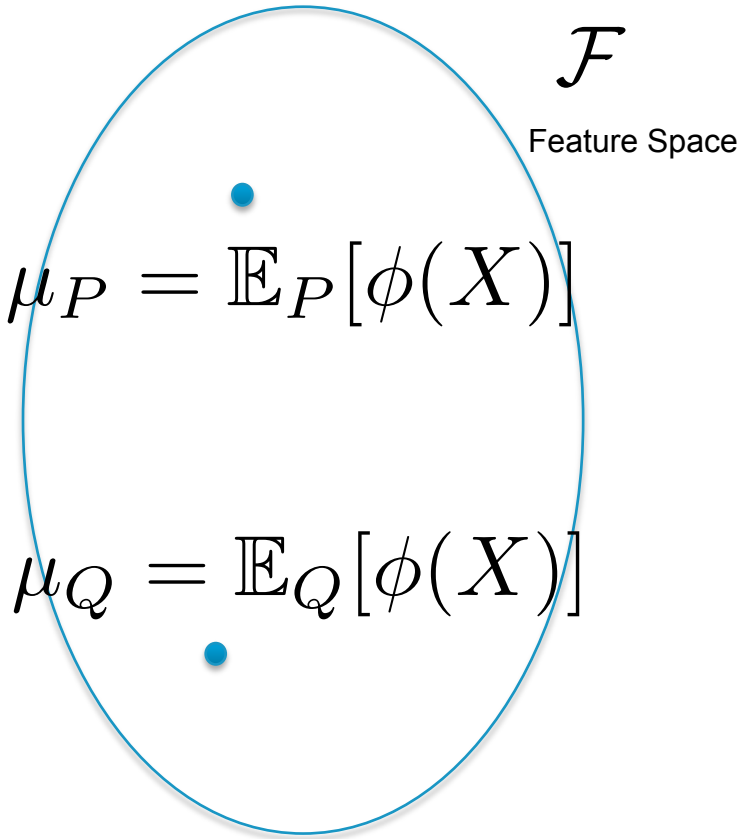
$$\phi : \ \Omega \to \mathcal{F}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING





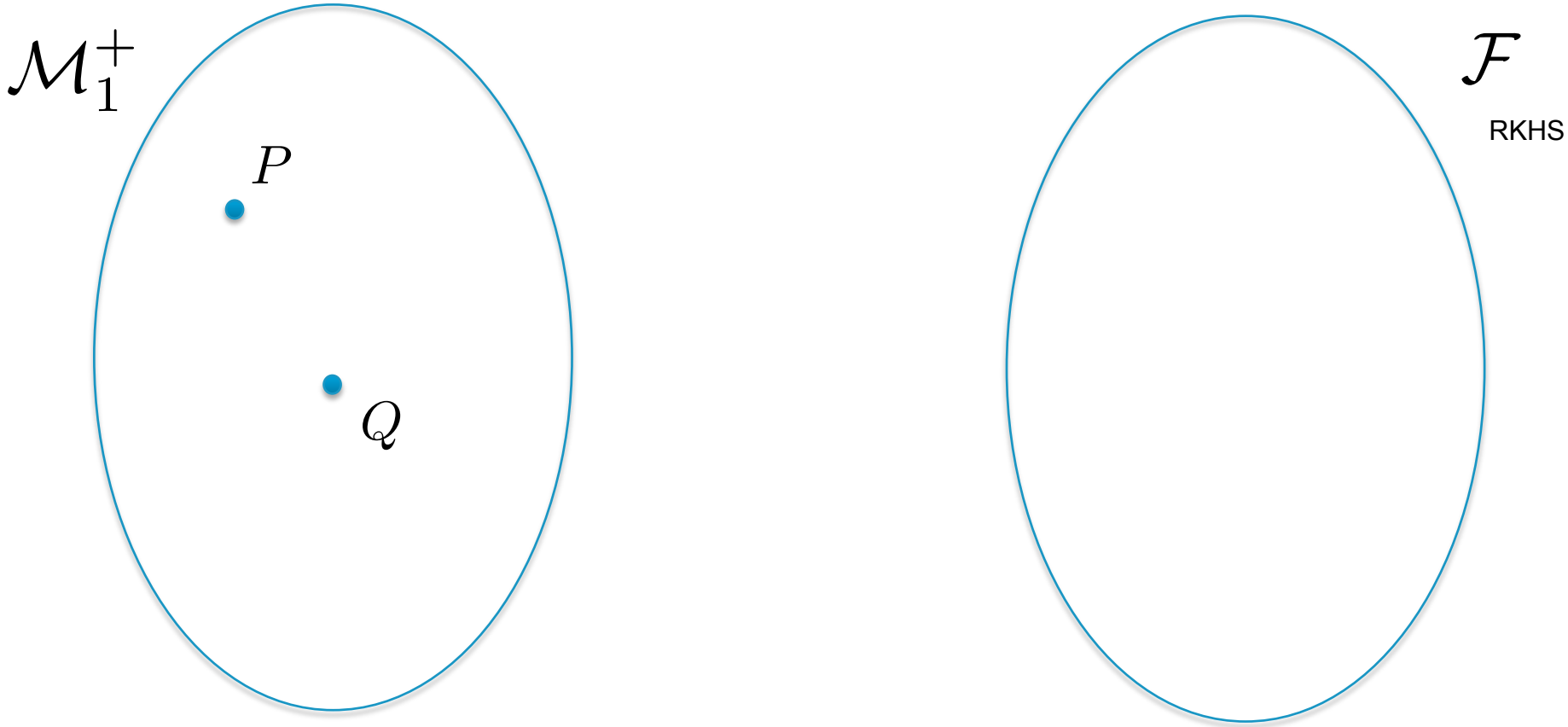
General setting: take a feature map

$$\phi : \ \Omega \to \mathcal{F}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



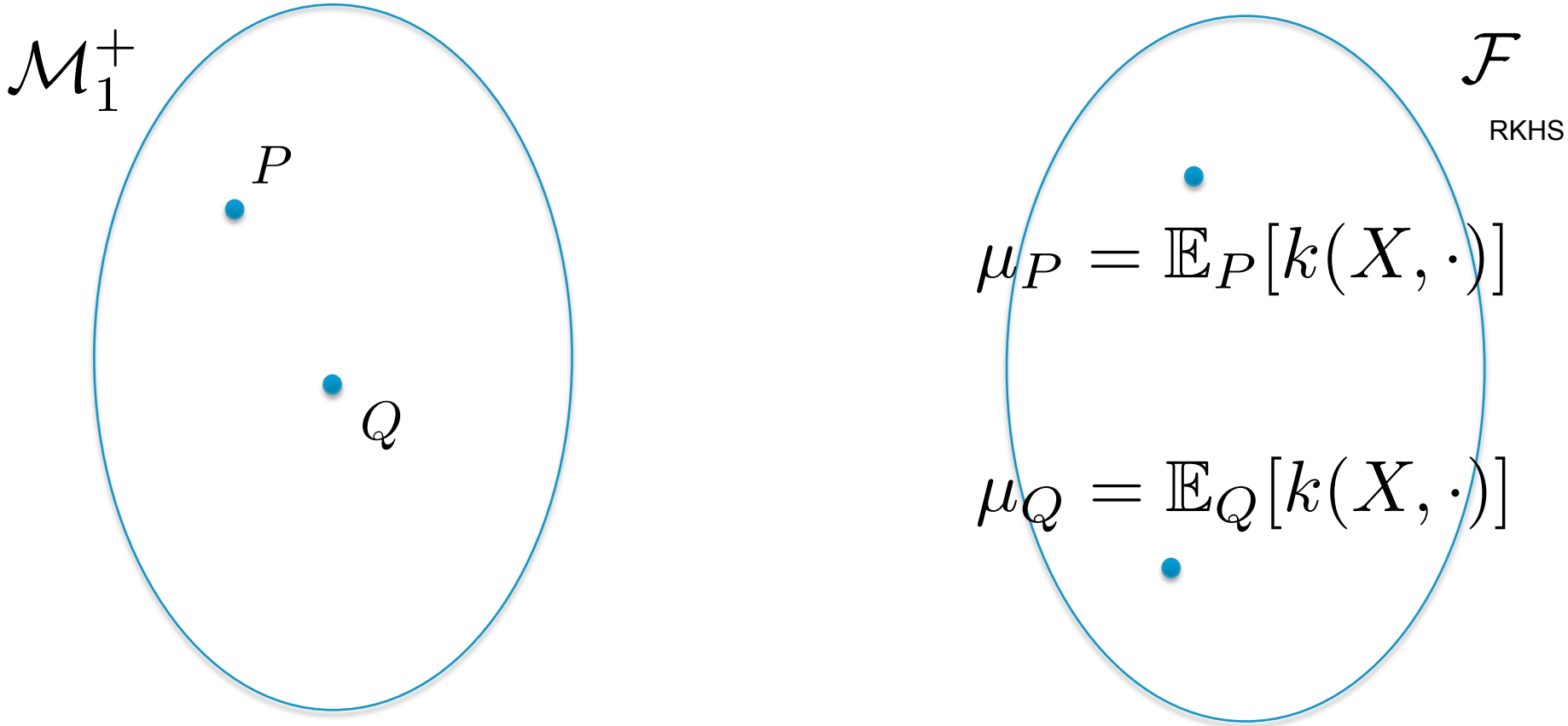
Instead of choosing the feature map, make it implicit and assume that the feature space is a RKHS with a given kernel

$$k(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{F}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING



Instead of choosing the feature map, make it implicit and assume that the feature space is a RKHS with a given kernel

$$k(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{F}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

➔ In practice

- Choose the kernel
- How can the distance be computed in the feature space ?

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING

➔ In practice

- Choose the kernel
- How can the distance be computed in the feature space ?

$$
\begin{aligned}
\|\mu_P - \mu_Q\|_{\mathcal{F}}^2 &= \langle \mu_P, \mu_P \rangle_{\mathcal{F}}^2 + \langle \mu_Q, \mu_Q \rangle_{\mathcal{F}}^2 - 2\langle \mu_P, \mu_Q \rangle_{\mathcal{F}} \\
&= \dots \\
&= \mathbb{E}_{X\sim P, X'\sim P}[k(X, X')] + \mathbb{E}_{Y\sim Q, Y'\sim Q}[k(Y, Y')] - 2\mathbb{E}_{X\sim P, Y\sim Q}[k(X, Y)]
\end{aligned}
$$

Standard reproducing RKHS property

- Distance which involves only the kernel
  - Kernel trick in action
- Several nice papers on the subject
  - Smola et al. 2007, Song 2008, Song et al. 2009

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: REMEMBER MMD ?

➔ Maximum Mean Discrepancy

$$\mathrm{MMD}(P, Q; F) := \sup_{f \in F} \left[\mathbb{E}_P f(x) - \mathbb{E}_Q f(x) \right]$$

➔ The distance is zero iif the probability distributions are equal

- F = bounded continuous functions (Dudley metric)
- F = functions with bounded variations (Kolmogorov metric)
- F = Lipschitz bounded functions (Earth mover's distance – Wasserstein metric)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: REMEMBER MMD ?

➔ **Maximum Mean Discrepancy**

$$\mathrm{MMD}(P, Q; F) := \sup_{f \in F} \left[\mathbb{E}_P f(x) - \mathbb{E}_Q f(x) \right]$$

➔ **The distance is zero iif the probability distributions are equal**

- F = bounded continuous functions (Dudley metric)
- F = functions with bounded variations (Kolmogorov metric)
- F = Lipschitz bounded functions (Earth mover's distance – Wasserstein metric)
- **F = unit ball in a characteristic RKHS** (Sriperumbudur et al. 2008)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: REMEMBER MMD ?

➔ Maximum Mean Discrepancy in a RKHS

$$\begin{aligned}\mathrm{MMD}^2(P,Q;F) &= \left(\sup_{f\in F}\left[\mathbb{E}_P f(x) - \mathbb{E}_Q f(x)\right]\right)^2 \\ &= \left(\sup_{f\in F}\left\langle f, \mu_P - \mu_Q\right\rangle_{\mathcal{F}}\right)^2 \\ &= \left\|\mu_P - \mu_Q\right\|_{\mathcal{F}}^2\end{aligned}$$

$$\|h\|_{\mathcal{F}} = \sup_{f\in F}\langle f, h\rangle_{\mathcal{F}}$$

MMD point of view and feature space point of view are equivalent

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: TOWARDS GSA

➔ General framework

$$S_i = \mathbb{E}_{X_i}\left(d(P_Y, P_{Y|X_i})\right)$$

➔ If we use the MMD distance

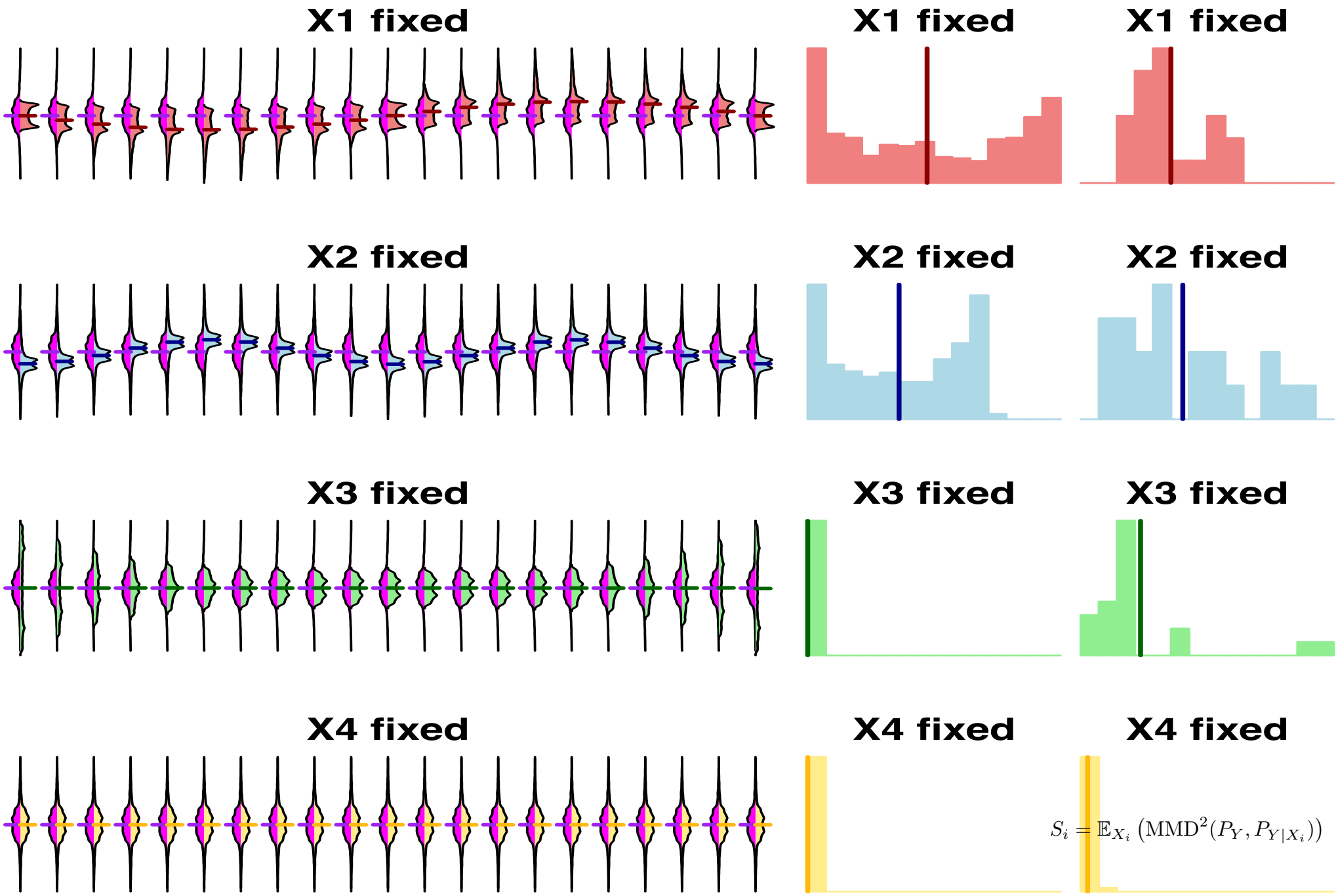
$$d(P_Y, P_{Y|X_i}) = \mathrm{MMD}^2(P_Y, P_{Y|X_i})$$

$$\boxed{S_i = \mathbb{E}_{X_i}\left(\mathrm{MMD}^2(P_Y, P_{Y|X_i})\right)}$$

$$S_i = \int_\Omega k(y, y')\left[p_Y(y) - p_{Y|X_i=x_i}(y)\right]\left[p_Y(y') - p_{Y|X_i=x_i}(y')\right] p_{X_i}(x_i) dy dy' dx_i$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY


X1 fixed
X1 fixed
X1 fixed
X2 fixed
X2 fixed
X2 fixed
X3 fixed
X3 fixed
X3 fixed
X4 fixed
X4 fixed
X4 fixed
$S_i = \mathbb{E}_{X_i}\left(\mathrm{MMD}^2(P_Y, P_{Y|X_i})\right)$

RKHS EMBEDDING: TOWARDS GSA

➔ A few remarks

- You can choose any kernel
- **If we want to distinguish probability distributions, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

- But in practice you can choose any kernel, including

$$k(y, y') = \langle y, y' \rangle \overset{\text{1D}}{=} yy'$$

Feature map is identity
Comparison through means only

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: TOWARDS GSA

➔ A few remarks

- You can choose any kernel
- **If we want to distinguish probability distributions, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

- But in practice you can choose any kernel, including

$$k(y, y') = \langle y, y' \rangle \overset{\text{1D}}{=} yy'$$

Feature map is identity
Comparison through means only

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2(P_Y, P_{Y|X_i})\right) = \mathrm{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))$$

Unnormalized Sobol index

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: TOWARDS GSA

➔ A few remarks

- You can choose any kernel
- **If we want to distinguish probability distributions, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

- But in practice you can choose any kernel, including

$$k(y, y') = \langle y, y' \rangle \overset{\text{1D}}{=} yy'$$

Feature map is identity
Comparison through means only

- This is thus a natural extension of Sobol

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: TOWARDS GSA

➔ A few remarks

- You can choose any kernel
- **If we want to distinguish probability distributions, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

- But in practice you can choose any kernel, including

$$k(y, y') = \langle y, y' \rangle \overset{\text{1D}}{=} yy'$$

Feature map is identity
Comparison through means only

- This is thus a natural extension of Sobol
- Question: where does the normalizing constant come from ?
  - Sobol-Hoeffding decomposition !
  - **Can we have the same ?**

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION I

➔ **Re-write the Sobol-Hoeffding decomposition**

$$\mathrm{Var}(Y) = \sum_{u \subseteq \{1,\ldots,d\}, u \neq \emptyset} g_u$$

$$g_u = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathrm{Var}\left(\mathbb{E}(Y|X_v)\right)$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION I

➔ **Theorem (D. 2016)**

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_{1:d}}, P_Y\right)\right) = \sum_{u \subseteq \{1,\ldots,p\}, u \neq \emptyset} g_u$$

$$g_u = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_v}, P_Y\right)\right)$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION I

➔ **Theorem (D. 2016)**

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_{1:d}}, P_Y\right)\right) = \sum_{u \subseteq \{1,\ldots,p\}, u \neq \emptyset} g_u$$

$$g_u = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_v}, P_Y\right)\right)$$

➔ **MMD sensitivity indices**

$$S_u^{\mathrm{MMD}} = \frac{\sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_v}, P_Y\right)\right)}{\mathbb{E}\left(\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y|X_{1:d}}, P_Y\right)\right)}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION I

➔ Alternate interpretation of MMD indices

- If we use a Mercer kernel,

$$k(y, y') = \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_j(y)\Phi_j(y')$$

- As a result, 1st order MMD indices are given by

$$S_i^{\mathrm{MMD}} = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} \mathrm{Var}(\mathbb{E}(\Phi_j(Y)|X_i))}{\sum_{j=1}^{\infty} \mathrm{Var}(\Phi_j(Y))} = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j S_i^{\mathrm{Sobol}}\left[\phi_j(Y)\right]$$

Linear combination of the Sobol index for a (potential) infinity of transformations of the output (i.e. features)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: ESTIMATION

➔ Standard MMD estimation

$$\widehat{\mathrm{MMD}}^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i}^{n} \left[k(x_i, x_j) - k(x_i, x'_j) - k(x'_i, x_j) + k(x'_i, x'_j) \right]$$

$$\{x_i\}_{i=1}^n \sim P, \ \{x'_i\}_{i=1}^n \sim Q$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: ESTIMATION

➔ Standard MMD estimation

$$\widehat{\mathrm{MMD}}^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i}^{n} \left[k(x_i, x_j) - k(x_i, x'_j) - k(x'_i, x_j) + k(x'_i, x'_j) \right]$$

$$\{x_i\}_{i=1}^n \sim P, \ \{x'_i\}_{i=1}^n \sim Q$$

➔ What about the MMD sensitivity index ?

$$S_i = \mathbb{E}_{X_i} \left(\mathrm{MMD}^2 (P_Y, P_{Y|X_i}) \right)$$

- Brute-force Monte-Carlo very expensive
- Possible to use Pick & Freeze estimation
- Ongoing investigation of replicated designs to get rid of the input dimension

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: ESTIMATION

➔ Standard MMD estimation

$$\widehat{\mathrm{MMD}}^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \neq i}^{n} \left[k(x_i, x_j) - k(x_i, x'_j) - k(x'_i, x_j) + k(x'_i, x'_j) \right]$$

$$\{x_i\}_{i=1}^n \sim P, \ \{x'_i\}_{i=1}^n \sim Q$$

➔ What about the MMD sensitivity index ?

$$S_i = \mathbb{E}_{X_i} \left(\mathrm{MMD}^2 (P_Y, P_{Y|X_i}) \right)$$

If you want to use a surrogate model bsaed on kriging, ask me the question at the end of the talk !

- Brute-force Monte-Carlo very expensive
- Possible to use Pick & Freeze estimation
- Ongoing investigation of replicated designs to get rid of the input dimension

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

➔ **We can go even further !**

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **We can go even further !**
- **Remember the density-based index**

$$S_i^{KL} = \int p_{Y|X_i=x}(y) \ln \left(\frac{p_{Y|X_i=x}(y)}{p_Y(y)} \right) p_{X_i}(x) dx dy$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **We can go even further !**
- **Remember the density-based index**

$$
\begin{aligned}
S_i^{KL} &= \int p_{Y|X_i=x}(y) \ln\left(\frac{p_{Y|X_i=x}(y)}{p_Y(y)}\right) p_{X_i}(x) dx dy \\
&= \int p_{Y,X_i}(y,x) \ln\left(\frac{p_{Y,X_i}(y,x)}{p_Y(y) p_{X_i}(x)}\right) dx dy = I(X_i;Y)
\end{aligned}
$$

Mutual Information

- **In this case, the sensitivity index is a dependence measure between random variables**

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **From a broad perspective, a dependence measure compares the joint distribution and the product of the marginals**
  - If close, the variables are dependent
  - How do we compare the joint distribution and the product of the marginals ?

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **From a broad perspective, a dependence measure compares the joint distribution and the product of the marginals**
  - If close, the variables are dependent
  - How do we compare the joint distribution and the product of the marginals ?

$$\begin{aligned}
\mathrm{MMD}^2\left(P_{Y,X}, P_Y P_X\right) &= \left(\sup_{f \in F}\left[\mathbb{E}_{P_{XY}} f(x,y) - \mathbb{E}_{P_X P_Y} f(x,y)\right]\right)^2 \\
&= \left\|\mu_{P_{XY}} - \mu_{P_X P_Y}\right\|^2_{\mathcal{F}\times\mathcal{G}} \\
&= \mathrm{HSIC}(X,Y)
\end{aligned}$$

Hilbert-Schmidt Independence Criterion
Gretton 2005

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

➔ **HSIC estimation from a sample of the joint distribution**

$$\widehat{\mathrm{HSIC}}(X,Y) = \frac{1}{n^2}\mathrm{trace}\left(KHLH\right)$$

$$[K]_{ij} = k_{\mathcal{X}}(x_i, x_j) \qquad [L]_{ij} = k_{\mathcal{Y}}(y_i, y_j) \qquad [H]_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{n}$$

$$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n} \sim P_{XY}$$

➔ **Several feature selection techniques based on this measure**

- Song et al. (2007a,b,c), Balasubramanian et al. (2013), Yamada et al. 2013

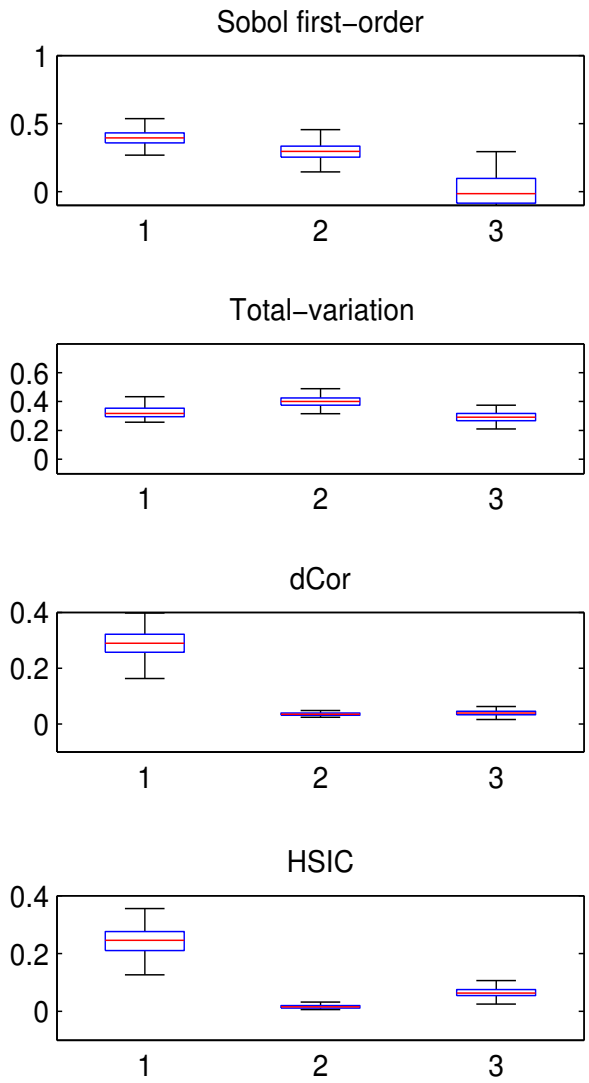
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **In a GSA context, just rank the input parameters according to their HSIC value with the output**
  - A normalization inspired by SRC is proposed in D. (2014)

- **Good screening properties**
  - At a very low computational cost (~ 100, independent of the input dimension)



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

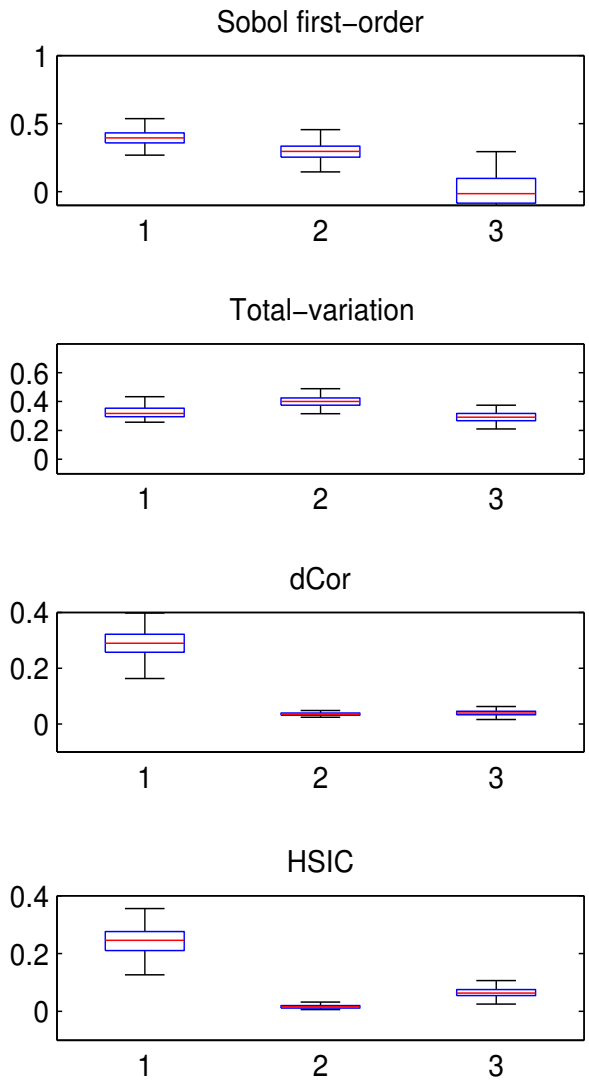
SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: FEATURE SELECTION

- **In a GSA context, just rank the input parameters according to their HSIC value with the output**
  - A normalization inspired by SRC is proposed in D. (2014)

- **Good screening properties**
  - At a very low computational cost (~ 100, independent of the input dimension)

- **Would be great if we could use this measure as a sensitivity index**
  - With particular case the MMD indices
  - With a decomposition
  - **Link between feature selection and GSA**



Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION II

➔ **Theorem (D. 2016)**

$$\mathrm{HSIC}\left(Y, X_{1:d}\right) = \sum_{u \subseteq \{1,\ldots,p\}, u \neq \emptyset} g_u$$

$$g_u = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathrm{HSIC}\left(Y, X_v\right)$$

If the kernel on each input satisfies

$$\int_{\mathcal{X}} k_{\mathcal{X}}(x, x') dP_X(x) = 1$$

$$\begin{aligned}
k_{\mathcal{X}} &= 1 + k^0_{\mathcal{X}} \\
k^0_{\mathcal{X}}(x, x') &= k(x, x') - \frac{\int_{\mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x') \int_{\mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x)}{\iint_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x) dP_X(x')} \\
k^0_{\mathcal{X}}(x, x') &= k(x, x') - \int_{\mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x') - \int_{\mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x) \\
&\quad + \iint_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}} k(x, x') dP_X(x) dP_X(x')
\end{aligned}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION II

➔ **Theorem (D. 2016)**

$$\mathrm{HSIC}\left(Y, X_{1:d}\right) = \sum_{u \subseteq \{1,\ldots,p\}, u \neq \emptyset} g_u$$

$$g_u = \sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathrm{HSIC}\left(Y, X_v\right)$$

$$\boxed{S_u^{\mathrm{HSIC}} = \frac{\sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathrm{HSIC}\left(Y, X_v\right)}{\mathrm{HSIC}\left(Y, X_{1:d}\right)}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION II

➔ More remarks

- You have to choose a kernel for each input and output
- **If we want to detect independence, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential
- The decomposition holds for a centered-like kernel
  - Actually same assumption for the ANOVA-kernel of Durrande et al. (2013)

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION II

➔ More remarks

- You have to choose a kernel for each input and output
- **If we want to detect independence, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential
- The decomposition holds for a centered-like kernel
  - Actually same assumption for the ANOVA-kernel of Durrande et al. (2013)
- **This is a natural extension again**

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

Uniform inputs

$$k_{\mathcal{X}}(x, x') \to \delta(x, x')$$

ex: $k_{\mathcal{X}}(x, x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(\frac{1}{2a^2}(x - x')^2\right), \quad a \to 0$

$$S_u^{\mathrm{HSIC}} \longrightarrow S_u^{\mathrm{MMD}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: DECOMPOSITION II

➔ More remarks

- You have to choose a kernel for each input and output
- **If we want to detect independence, we must use a characteristic kernel**
  - e.g. Gaussian, exponential
- The decomposition holds for a centered-like kernel
  - Actually same assumption for the ANOVA-kernel of Durrande et al. (2013)
- **This is a natural extension again**

Fukumizu et al. (2008)
Sriperumbudur et al. (2008)

Uniform inputs

$$k_{\mathcal{X}}(x, x') \to \delta(x, x')$$

ex: $k_{\mathcal{X}}(x, x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(\frac{1}{2a^2}(x - x')^2\right), \quad a \to 0$

$$S_u^{\mathrm{HSIC}} \longrightarrow S_u^{\mathrm{MMD}}$$

$$k_{\mathcal{Y}}(y, y') = yy'$$

$$S_u^{\mathrm{MMD}} = S_u^{\mathrm{Sobol}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

- **The RKHS point of view comes with a huge literature and dedicated kernels**
  - If your inputs or outputs are vectors, curves, texts, images, timeseries, DNA sequences, probability distributions, … there is a kernel available
    - **We then have a generic GSA framework which can handle them, with a decomposition into main effects and interactions**

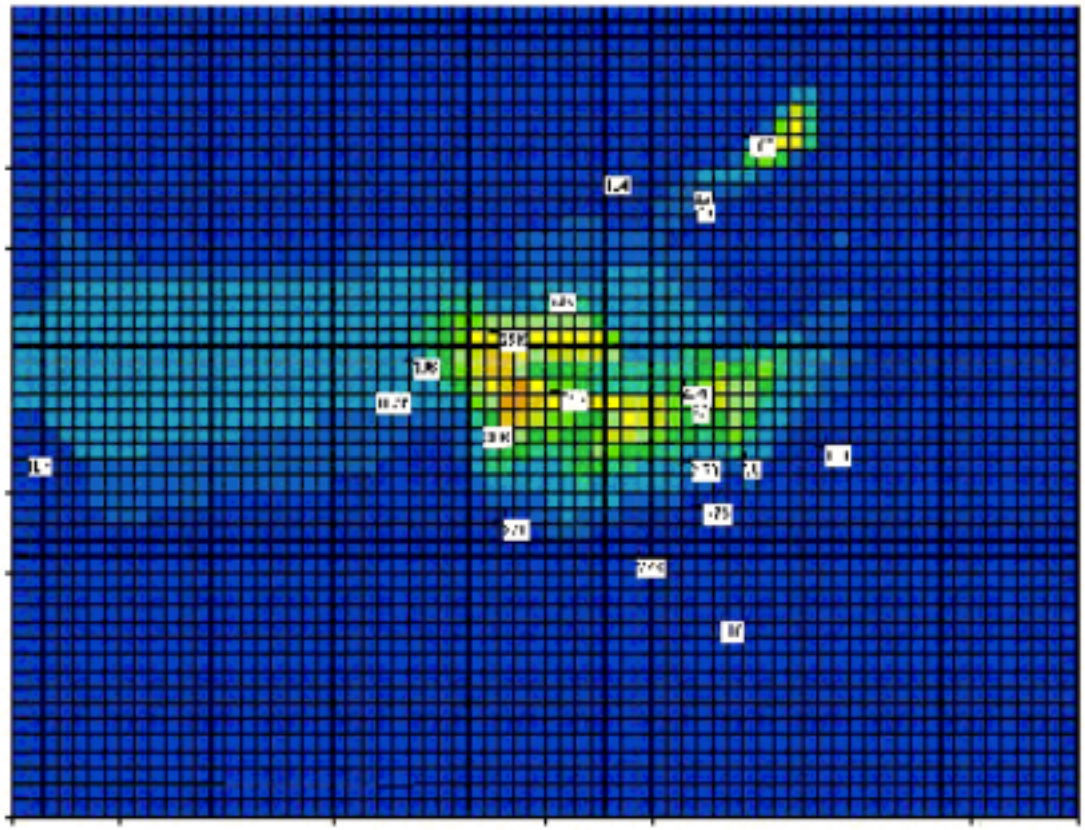
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 1: migration of strontium 90 in a storage site (Marthe testcase CEA)

- Inputs
  - 20 geological parameters
- Outputs
  - Strontium concentration at 10 observation wells
  - 2D maps of concentration (64x64=4096 pixels)



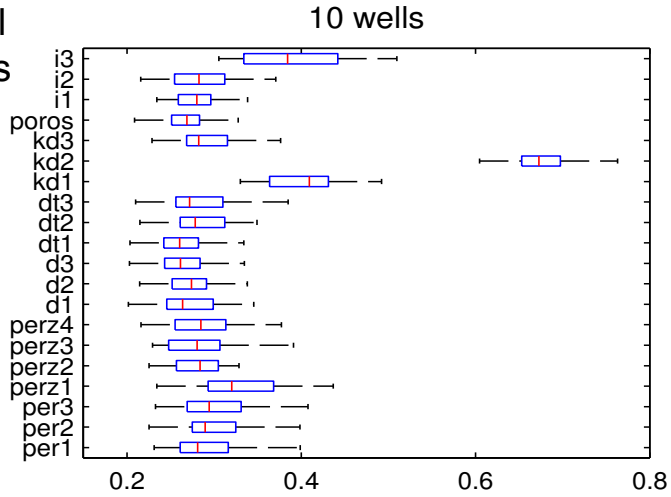
Marrel et al. 2011

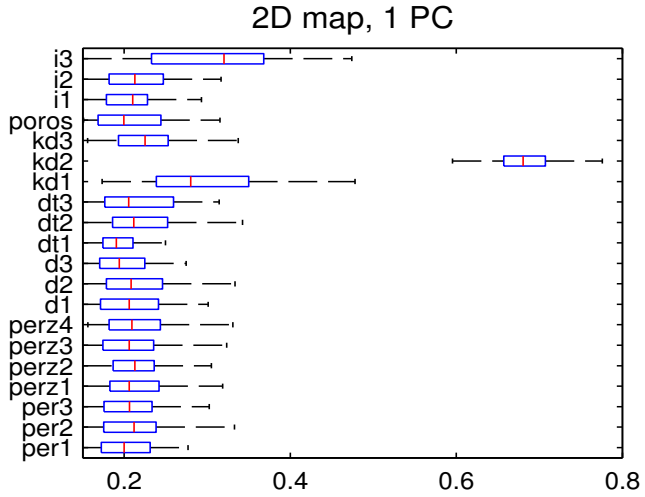
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

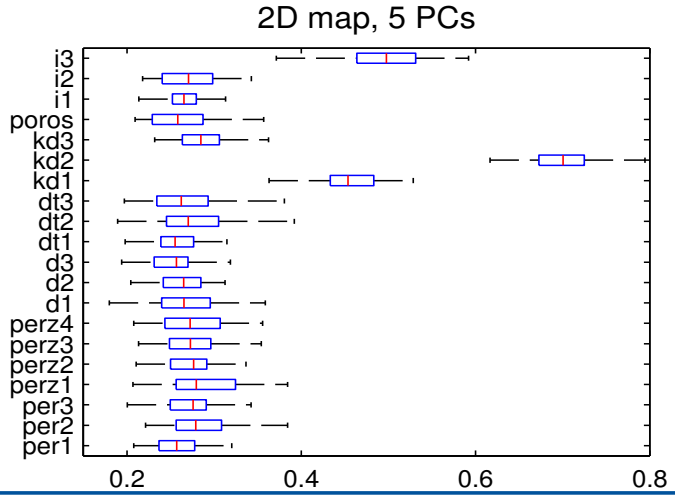
RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

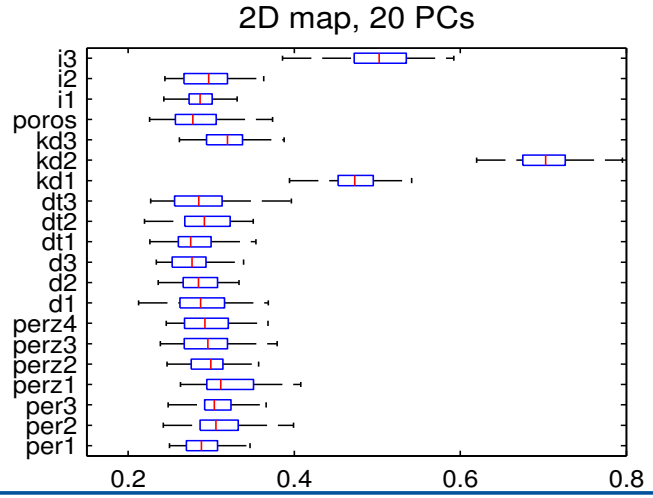
Gaussian kernel in 10 dimensions (wells)





PCA kernel on 2D maps





D. 2014

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: uncertainty on the distribution assigned to the input parameters

- Fact: in practice it may be hard to model the uncertainty on the input parameters
  - Diverging expert judgments, no available data,…

- Question : is it a concern for some of the inputs ?
  - In other words, if we change the probability distribution of an input, does this change the result of the sensitivity analysis ?

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: uncertainty on the distribution assigned to the input parameters

- Fact: in practice it may be hard to model the uncertainty on the input parameters
  - Diverging expert judgments, no available data,…

- Question : is it a concern for some of the inputs ?
  - In other words, if we change the probability distribution of an input, does this change the result of the sensitivity analysis ?

➔ Usual problem

$$X_1, \ldots, X_d$$

$$\mathbb{P}_{X_1}, \ldots, \mathbb{P}_{X_d}$$

Model
For a given value of the inputs, we compute the value of the output

$$Y$$

$$\mathbb{P}_Y$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: uncertainty on the distribution assigned to the input parameters

- Fact: in practice it may be hard to model the uncertainty on the input parameters
  - Diverging expert judgments, no available data,…

- Question : is it a concern for some of the inputs ?
  - In other words, if we change the probability distribution of an input, does this change the result of the sensitivity analysis ?

➔ Higher-level problem

$$\mathbb{P}_{X_1}, \ldots, \mathbb{P}_{X_d}$$

$$\mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_1}}, \ldots, \mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_d}}$$

⇒

Model
For a given combination of input distributions, we report the result of the sensitivity analysis

⇒

$$S_1, \ldots, S_d$$

$$\mathbb{P}_{S_1, \ldots, S_d}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: uncertainty on the distribution assigned to the input parameters

- Fact: in practice it may be hard to model the uncertainty on the input parameters
  - Diverging expert judgments, no available data,…

- Question : is it a concern for some of the inputs ?
  - In other words, if we change the probability distribution of an input, does this change the result of the sensitivity analysis ?

➔ Higher-level problem

$$\mathbb{P}_{X_1}, \ldots, \mathbb{P}_{X_d}$$

$$\mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_1}}, \ldots, \mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_d}}$$

Model
For a given combination of input distributions, we report the result of the sensitivity analysis

$$\mathbb{P}_{S_1,\ldots,S_d}$$

Not necessarily what is interesting
Idea : ranking of variables

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: uncertainty on the distribution assigned to the input parameters

- Fact: in practice it may be hard to model the uncertainty on the input parameters
  - Diverging expert judgments, no available data,…

- Question : is it a concern for some of the inputs ?
  - In other words, if we change the probability distribution of an input, does this change the result of the sensitivity analysis ?

➔ Higher-level problem

$$\mathbb{P}_{X_1}, \ldots, \mathbb{P}_{X_d}$$

$$\mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_1}}, \ldots, \mathbb{P}_{\mathbb{P}_{X_d}}$$

⇒

Model
For a given combination of input distributions, we report the result of the sensitivity analysis

⇒

Rank of the input variables

$$R_1, \ldots, R_d$$

$$\mathbb{P}_{R_1, \ldots, R_d}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Higher-level problem

- Goal: for each input variable, compute the HSIC index between its probability distribution and the list containing the rankings

➔ Is it possible ? Which kernels ?

- Kernel on the « inputs »
  - Kernel for probability distributions

- Kernel on the « output »
  - Kernel for ranking lists

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Higher-level problem

- Goal: for each input variable, compute the HSIC index between its probability distribution and the list containing the rankings

➔ Is it possible ? Which kernels ?

- Kernel on the « inputs »
  - Kernel for probability distributions

$$k(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \exp\left(-\gamma \mathrm{MMD}^2(\mathbb{P}, \mathbb{Q})\right)$$

Sriperumbudur 2010

- Kernel on the « output »
  - Kernel for ranking lists

$$k(\{R_i\}, \{R'_i\}) = \exp\left(-\gamma K(\{R_i\}, \{R'_i\})\right)$$

Jiao & Vert 2015

Kendall's Tau Distance

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: Ishigami function

$$Y = \sin(X_1) + 3\sin^2(X_2) + 0.1X_3^4\sin(X_1)$$

➔ Uncertainty on the input distributions

- With probability 1/3, uniform distribution on [0,1]
- With probability 1/3, triangular distribution on [0,1] with mode chosen uniformly in [0,1]
- With probability 1/3, truncated Gaussian distribution on [0,1] with mean chosen uniformly in [0.25,0.75] and standard deviation equal to 0.1

➔ Question : does the uncertainty on the input distribution have an impact on the ranking of the most influential variables

- The ranking here is performed according to 1st order Sobol indices, which are computed by Pick & Freeze with a sample of size 1000

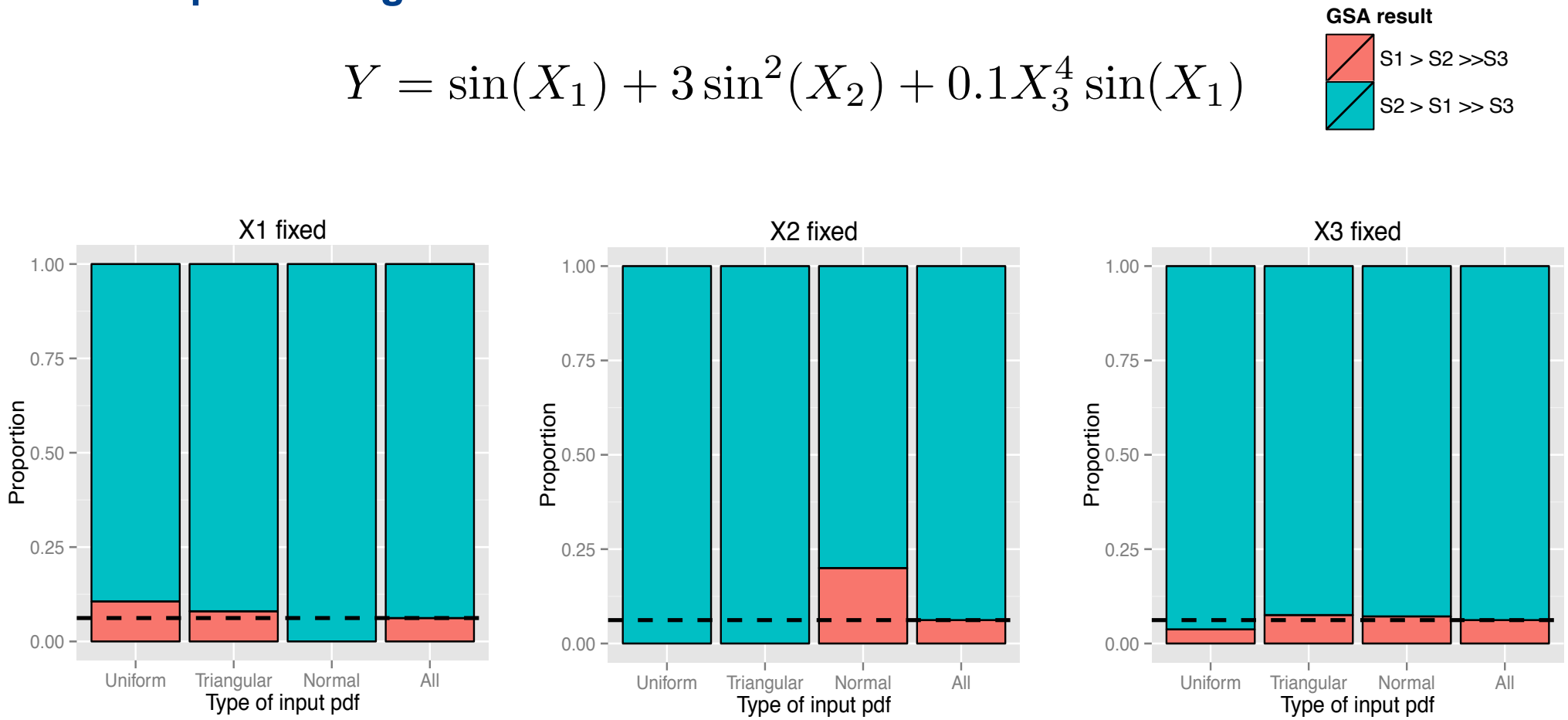
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: Ishigami function

$$Y = \sin(X_1) + 3\sin^2(X_2) + 0.1X_3^4\sin(X_1)$$



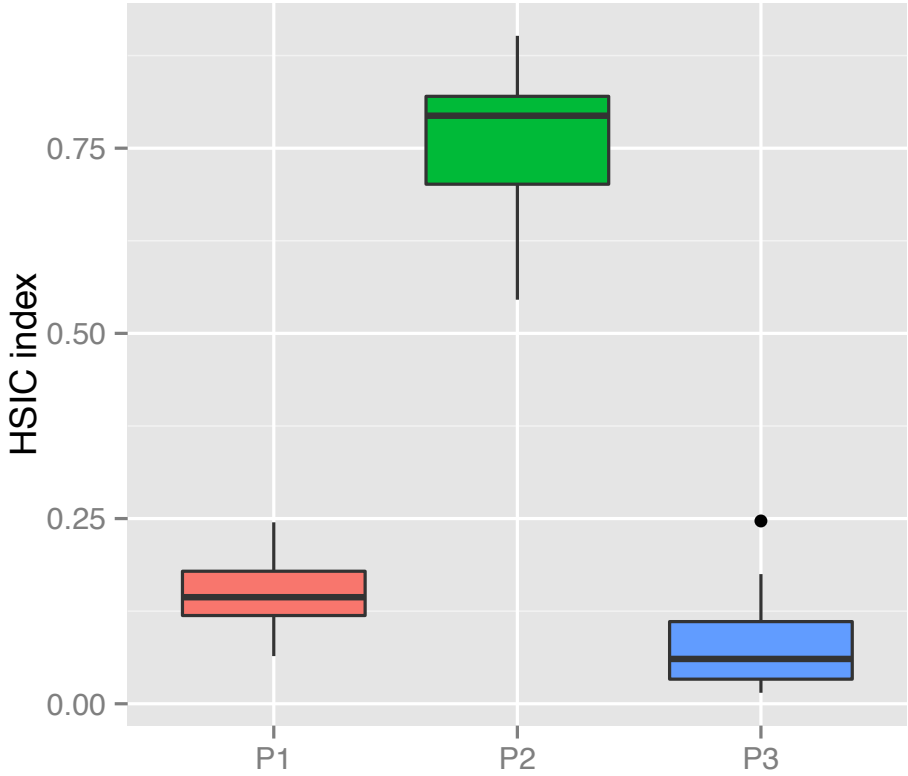
Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Example 2: Ishigami function

$$Y = \sin(X_1) + 3\sin^2(X_2) + 0.1X_3^4\sin(X_1)$$



20 repetitions, 100 combinations of input distribution

- The choice of the distribution X3 does not influence the ranking
- The distribution of X2 has the highest impact: it may be interested to invest time & money to improve the knowledge of this distribution

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ **Goal-oriented here: we want to detect which inputs impact the fact that the output takes specific values**

- Examples
  - The output is above a threshold
  - The output is below a quantile
  - A mixture of the above
    - Constrained optimization: the objective is low (i.e. below a small quantile) and the constraints are satisfied (i.e. above a threshold)

- Approach: transform the output(s) and create a binary variable

$$Z = 1_{(Y \in \mathcal{R})}$$

Region of interest for your goal

- Finally use a dedicated kernel for categorical variables

$$l(z, z') \propto \delta_{zz'}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ We can then define a goal-oriented sensitivity index

- General formulation …

$$S_i^{\mathcal{R}} = \mathrm{HSIC}(X_i, Z = 1_{Y \in \mathcal{R}})$$

- … which can be transformed into (after some calculation)

$$S_i^{\mathcal{R}} \propto \mathrm{MMD}^2 \left(P_{X_i | Y \in \mathcal{R}}, P_{X_i} \right) \qquad l(z, z') \propto \delta_{zz'}$$

➔ What are we measuring ?

- A sort of "reverse" sensitivity analysis based on conditional densities
  - The impact of an input is linked to how much its probability distribution changes when it is restricted via the output
- With an orthogonal decomposition ! (if input kernel satisfies previous property)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ **Example from constrained optimization**

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

$$\text{s.t.} \quad h(x) \leq 0$$

➔ **Change of variable**

$$Z = 1_{(f(X) \leq q_\alpha,\ h(X) \leq 0)}$$

$$l(z, z') \propto \delta_{zz'}$$

Internship of A. Spagnol
(IRT SystemX 2016)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

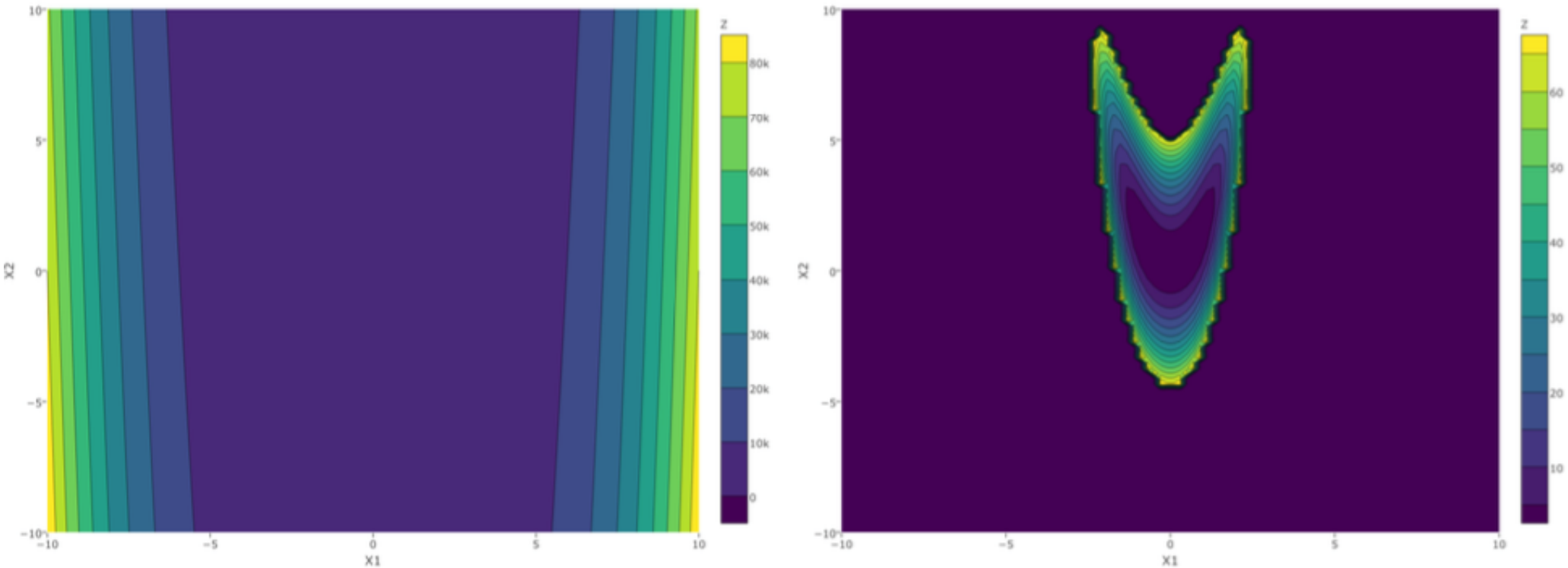


FIGURE 2.1: Contour of the Dixon Price original version (left) and modified version Y_{indic} for $\alpha = 10$(right)

Internship of A. Spagnol
(IRT SystemX 2016)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

Pbm	d	m	$\Gamma(\%)$	Best	Target
g1	13	9	$4 \cdot 10^{-4}$	-15	-14.85
g5mod	4	5	$8.7 \cdot 10^{-2}$	5126.2	5150
g9	7	4	0.52	680.6	1000
g10	8	6	$7 \cdot 10^{-4}$	7049.4	8000
g13mod	5	3	4.5	0.0035	0.005
g19	15	5	$3.4 \cdot 10^{-3}$	32.66	40
PVD4	4	3	$5.6 \cdot 10^{-1}$	5804.3	6000
WB4	4	6	$5.6 \cdot 10^{-2}$	2.3813	2.5

TABLE 3.1: Main features of the mono-objective problems taken from Regis (2014)

Internship of A. Spagnol
(IRT SystemX 2016)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

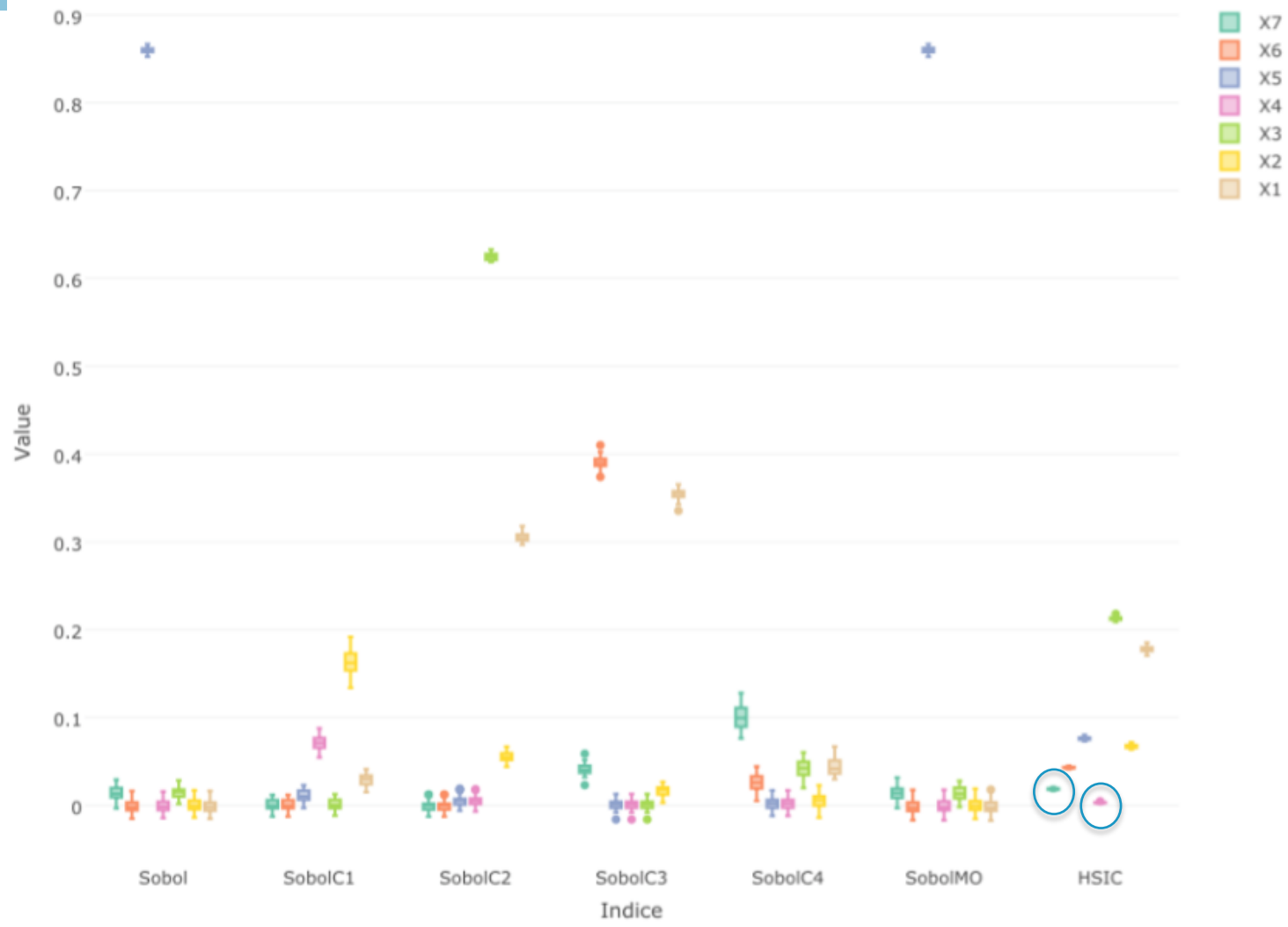
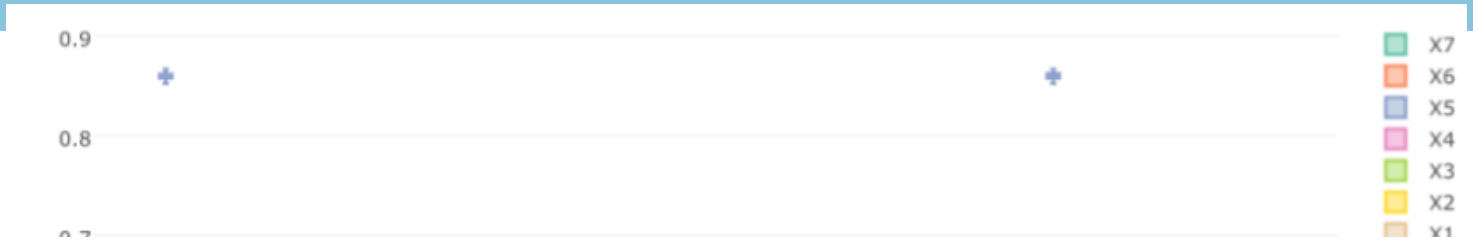


FIGURE 3.4: Sensitivity analysis results for g9 problem

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS



g9	Normal		$X_4 = 0$		$X_4 = X_7 = 0$	
	%	n_{call}	%	n_{call}	%	n_{call}
COB	73	7992.1	80	6210.2	87	3067.1
SQP	74	893.3	76	720.3	71	582.7

TABLE 3.5: Optimization results for g9 problem

FIGURE 3.4: Sensitivity analysis results for g9 problem

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ Promising results on most benchmark functions

- Better convergence
- Less function calls

➔ Perspectives

- Sensitivity analysis « on the fly » during optimization
  - With the possibility to play with the quantile level
- Investigate other strategies when fixing the uninfluential inputs
- Will be studied during a PhD at Safran

Internship of A. Spagnol
(IRT SystemX 2016)

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

- **The RKHS point of view comes with a huge literature and dedicated kernels**
  - If your inputs or outputs are vectors, curves, texts, images, timeseries, DNA sequences, probability distributions, … there is a kernel available
    - **We then have a generic GSA framework which can handle them, with a decomposition into main effects and interactions**
  - And you can recover previously studied sensitivity indices with particular kernels

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

- **The RKHS point of view comes with a huge literature and dedicated kernels**
  - If your inputs or outputs are vectors, curves, texts, images, timeseries, DNA sequences, probability distributions, … there is a kernel available
    - **We then have a generic GSA framework which can handle them, with a decomposition into main effects and interactions**

  - And you can recover previously studied sensitivity indices with particular kernels

$$k_{\mathcal{X}}(x, x') \to \delta(x, x')$$

ex: $k_{\mathcal{X}}(x, x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(\frac{1}{2a^2}(x - x')^2\right), \quad a \to 0$

$$S_u^{\mathrm{HSIC}} \longrightarrow S_u^{\mathrm{MMD}}$$

$$k_{\mathcal{Y}}(y, y') = yy'$$

$$S_u^{\mathrm{MMD}} = S_u^{\mathrm{Sobol}}$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

- **The RKHS point of view comes with a huge literature and dedicated kernels**
  - If your inputs or outputs are vectors, curves, texts, images, timeseries, DNA sequences, probability distributions, … there is a kernel available
    - **We then have a generic GSA framework which can handle them, with a decomposition into main effects and interactions**

  - And you can recover previously studied sensitivity indices with particular kernels

$$k_{\mathcal{X}_{-i}}(x, x') \to \delta(x, x') \qquad k_{\mathcal{X}_i}(x, x') \to \delta'(x, x')$$

$$k_{\mathcal{Y}}(y, y') = yy'$$

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

RKHS EMBEDDING: LET'S PLAY WITH KERNELS

➔ **The RKHS point of view comes with a huge literature and dedicated kernels**

- If your inputs or outputs are vectors, curves, texts, images, timeseries, DNA sequences, probability distributions, … there is a kernel available
  - **We then have a generic GSA framework which can handle them, with a decomposition into main effects and interactions**

- And you can recover previously studied sensitivity indices with particular kernels

$$k_{\mathcal{X}_{-i}}(x, x') \to \delta(x, x') \qquad k_{\mathcal{X}_i}(x, x') \to \delta'(x, x')$$

$$k_{\mathcal{Y}}(y, y') = yy'$$

$$\boxed{S_i^{\mathrm{HSIC}} \to \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \eta(x)}{\partial x_i} \right)^2 dx}$$

We recover the 1st order DGSM indices !

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONCLUSION

➔ **New sensitivity index which generalizes GSA through the use of kernels**

$$S_u^{\mathrm{HSIC}} = \frac{\sum_{v \subseteq u} (-1)^{|u|-|v|} \mathrm{HSIC}\left(Y, X_v\right)}{\mathrm{HSIC}\left(Y, X_{1:d}\right)}$$

- In theory, this is a density-based index: better measure of the influence than a mere mean
- Limiting cases include Sobol & DGSM
- Decomposition into main effects & interactions: interpretation is possible
- Built upon a feature selection technique: the frontier between screening methods and quantitative approaches may disappear

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONCLUSION

- **I honestly think there is potentiel there, but**
  - Extensive benchmark studies are still needed
    - In particular kernels for curves, 3D objects, …

- **From a theoretical perspective**
  - Investigate the links with ANOVA-kernels
  - See if we can recover other sensitivity indices as particular cases
  - Use replicated designs for MMD indices estimation

- **Should be soon available in the R package sensitivity**

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

CONCLUSION

Groupement de Recherche
MASCOT-NUM
Méthodes d'Analyse Stochastique pour les COdes et Traitements NUMériques

COME SEE US AT THE NEXT GDR ANNUAL MEETING

SAFRAN – MASSY
22/03 – 24/03 2017

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

SAFRAN
AEROSPACE · DEFENCE · SECURITY

REFERENCES

Balasubramanian, K., Sriperumbudur, B., & Lebanon, G. (2013). Ultrahigh dimensional feature screening via rkhs embeddings. In Proceedings of the Sixteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (pp. 126-134).

Baucells, M., & Borgonovo, E. (2013). Invariant probabilistic sensitivity analysis.Management Science, 59(11), 2536-2549.

Borgonovo, E. (2007). A new uncertainty importance measure. Reliability Engineering & System Safety, 92(6), 771-784.

Da Veiga, S. (2015). Global sensitivity analysis with dependence measures.Journal of Statistical Computation and Simulation, 85(7), 1283-1305.

Durrande, N., Ginsbourger, D., Roustant, O., & Carraro, L. (2013). ANOVA kernels and RKHS of zero mean functions for model-based sensitivity analysis.Journal of Multivariate Analysis, 115, 57-67.

Fort, J. C., Klein, T., & Rachdi, N. (2015). New sensitivity analysis subordinated to a contrast. To appear in Communications in Statistics-Theory and Methods.

Fukumizu, K., Gretton, A., Sun, X., & Schölkopf, B. (2007, December). Kernel Measures of Conditional Dependence. In NIPS (Vol. 20, pp. 489-496).

Gretton, A., Herbrich, R., Smola, A., Bousquet, O., & Schölkopf, B. (2005). Kernel methods for measuring independence. The Journal of Machine Learning Research, 6, 2075-2129.

Gretton, A. (2012). Kernel Distribution Embeddings: Theory and Applications, Slides from a talk at the Oxford statistics department, http://www.gatsby.ucl.ac.uk/~gretton/papers/oxford12.pdf

Iooss, B., & Lemaître, P. (2015). A review on global sensitivity analysis methods. In Uncertainty Management in Simulation-Optimization of Complex Systems (pp. 101-122). Springer US.

Jiao, Y., & Vert, J. P. (2015). The Kendall and Mallows kernels for permutations. In Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning (ICML-15) (pp. 1935-1944)

Krzykacz-Hausmann, B. (2001). Epistemic sensitivity analysis based on the concept of entropy. In International symposium on sensitivity analysis of model output (pp. 53-57).

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.

REFERENCES

Lamboni, M., Iooss, B., Popelin, A. L., & Gamboa, F. (2013). Derivative-based global sensitivity measures: general links with Sobol'indices and numerical tests. Mathematics and Computers in Simulation, 87, 45-54.

Lemaître, P., Sergienko, E., Arnaud, A., Bousquet, N., Gamboa, F., & Iooss, B. (2015). Density modification-based reliability sensitivity analysis. Journal of Statistical Computation and Simulation, 85(6), 1200-1223.

Marrel, A., Iooss, B., Jullien, M., Laurent, B., & Volkova, E. (2011). Global sensitivity analysis for models with spatially dependent outputs. Environmetrics,22(3), 383-397.

Smola, A., Gretton, A., Song, L., & Schölkopf, B. (2007, October). A Hilbert space embedding for distributions. In Algorithmic learning theory (pp. 13-31). Springer Berlin Heidelberg.

Song, L., Smola, A., Gretton, A., Borgwardt, K. M., & Bedo, J. (2007, June). Supervised feature selection via dependence estimation. In Proceedings of the 24th international conference on Machine learning (pp. 823-830). ACM.

Song, L., Smola, A., Gretton, A., & Borgwardt, K. M. (2007, June). A dependence maximization view of clustering. In Proceedings of the 24th international conference on Machine learning (pp. 815-822). ACM.

Song, L., Bedo, J., Borgwardt, K. M., Gretton, A., & Smola, A. (2007). Gene selection via the BAHSIC family of algorithms. Bioinformatics, 23(13), i490-i498.

Song, L. (2008). Learning via Hilbert space embedding of distributions. PhD Thesis, University of Sidney.

Song, L., Huang, J., Smola, A., & Fukumizu, K. (2009, June). Hilbert space embeddings of conditional distributions with applications to dynamical systems. In Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning (pp. 961-968). ACM.

Sriperumbudur, B. K., Gretton, A., Fukumizu, K., Lanckriet, G. R., & Schölkopf, B. (2008, July). Injective Hilbert Space Embeddings of Probability Measures. InCOLT (Vol. 21, pp. 111-122).

Sriperumbudur, B. K., Gretton, A., Fukumizu, K., Schölkopf, B., & Lanckriet, G. R. (2010). Hilbert space embeddings and metrics on probability measures. The Journal of Machine Learning Research, 11, 1517-1561.

Yamada, M., Jitkrittum, W., Sigal, L., Xing, E. P., & Sugiyama, M. (2014). High-dimensional feature selection by feature-wise kernelized lasso. Neural computation, 26(1), 185-207.

Ce document et les informations qu'il contient sont la propriété de Safran. Ils ne doivent pas être copiés ni communiqués à un tiers sans l'autorisation préalable et écrite de Safran.