

APPROXIMATION DE LA FONCTION COMMITTOR D'UN PROCESSUS STOCHASTIQUE SUR UN GRAPHE

Guillaume Chennetier^{1,2} & Hassane Chraïbi¹ & Anne Dutfoy¹ & Josselin Garnier²

¹ *EDF Lab Paris-Saclay, France.*

{guillaume.chennetier,hassane.chraïbi,anne.dutfoy}@edf.fr

² *CMAP, CNRS, Ecole polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, France.*

{guillaume.chennetier,josselin.garnier}@polytechnique.edu

Résumé. On s'intéresse à l'estimation de la probabilité qu'un processus de Markov déterministe par morceaux (PDMP) atteigne une certaine région de son espace d'états avant un horizon de temps fixé. Une méthode de Monte-Carlo standard n'est plus adaptée dès lors que l'événement est suffisamment rare. On sait que la méthode d'échantillonnage préférentiel optimale dans ce cas repose sur la connaissance de la fonction dite committor du processus. Celle-ci indique la probabilité de réaliser l'événement sachant l'état du processus à un instant donné. Nous proposons une méthode d'approximation de cette fonction committor basée sur les temps moyens d'atteinte d'une région cible pour une marche aléatoire sur un graphe. Ces temps sont calculables explicitement pour des marches aléatoires homogènes qui imitent le fonctionnement du PDMP de départ.

Mots-clés. Simulation d'événements rares, Processus de Markov déterministes par morceaux, Échantillonnage préférentiel, Temps d'atteinte, Marche aléatoire.

Abstract. We are interested in estimating the probability that a piecewise deterministic Markov process (PDMP) reaches a certain region of its state space before a fixed time horizon. A standard Monte-Carlo method is no longer appropriate when the event is sufficiently rare. We know that the optimal importance sampling method in this case is based on the knowledge of the so-called committor function of the process. This function indicates the probability of realizing the event knowing the state of the process at a given time. We propose a method to approximate this committor function based on the mean hitting time of a target region for a random walk on a graph. These times can be computed explicitly for homogeneous random walks that mimic the original PDMP.

Keywords. Rare event simulation, Piecewise deterministic Markov processes, Importance sampling, Hitting times, Random walk.

1 Introduction

Les processus de Markov déterministes par morceaux (PDMPs) offrent une grande capacité de modélisation (par exemple en biologie [8] ou en fiabilité industrielle [7]) mais parfois au prix d'un coût de simulation élevé. Le recours à des méthodes de Monte-Carlo massives n'est donc

pas toujours possible pour estimer des quantités dépendant de la réalisation de trajectoires de PDMP. C’est en particulier le cas lorsqu’on souhaite estimer la probabilité d’un événement rare [1]. Il est connu depuis [5] qu’une méthode d’échantillonnage préférentielle optimale de PDMP pour la simulation d’événements rares s’appuie sur la fonction “committor” du processus. Cette fonction indique à chaque instant de la trajectoire la probabilité de réaliser l’événement rare sachant l’état de la trajectoire. Si elle était connue, il serait possible de construire un estimateur de variance nulle de la probabilité de l’événement rare. En pratique il faut se contenter de l’approcher. Dans un travail récent [3], en utilisant des outils fiabilistes classiques nous avons proposé une méthode d’approximation de cette fonction committor pour des PDMPs modélisant des systèmes industriels dont on souhaite estimer la probabilité de défaillance.

Nous souhaitons à présent proposer une nouvelle méthode d’approximation de la fonction committor, plus fine et applicable à une plus grande variété de PDMPs. L’état d’un PDMP au cours du temps est décrit à la fois par une variable continue appelée position et par une variable discrète appelée mode. Une trajectoire de PDMP peut-être vue comme une marche aléatoire inhomogène en temps sur un graphe dont les sommets sont les modes du PDMP.

On considère dans ce travail des événements rares qui ne sont réalisés qu’après la visite d’un certain sous-ensemble de modes clés (noté par la suite $\mathbb{M}_D$). Une bonne approximation de la fonction committor doit donc refléter la proximité de chaque mode à l’ensemble $\mathbb{M}_D$. La notion de proximité qui nous paraît pertinente dans ce cas de figure est le temps moyen que mettrait la marche aléatoire pour atteindre $\mathbb{M}_D$ depuis un mode donné [2]. Dans le cas d’une marche aléatoire homogène, ce temps moyen est explicite. En pratique, calculer les temps moyens d’atteinte de $\mathbb{M}_D$ pour une marche aléatoire homogène simple (qui ne favorise aucun sommet) sur le même graphe que le PDMP d’origine nous permet déjà de construire une approximation précise de la fonction committor.

Nous rappelons les bases des PDMPs en section 2 et l’échantillonnage préférentiel de PDMP en section 3. Notre méthode d’approximation de la fonction committor à l’aide des temps moyens d’atteinte d’une marche aléatoire est exposée en section 4. Nous décrivons l’algorithme complet d’estimation de la probabilité d’événement rare à l’aide d’une procédure d’entropie croisée [6] adossée à une famille d’approximations de la fonction committor en section 5. Et enfin nous présentons une application numérique en fiabilité industrielle en section 6 sur un exemple issu de l’industrie nucléaire : la piscine de combustible usagé.

2 Processus de Markov déterministes par morceaux (PDMPs)

L’état du PDMP à l’instant $t \geq 0$ est noté $Z_t = (X_t, M_t) \in E$ où $X_t \in \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^{d_x}$ est la *position* (avec $d_x \in \mathbb{N}^*$) et $M_t \in \mathbb{M}$ est le *mode* du PDMP (avec $\mathbb{M}$ fini ou dénombrable et $E = \mathbb{X} \times \mathbb{M}$). Soit $t_{\max} > 0$, on note désormais $\mathcal{Z} := (Z_t)_{t \in [0, t_{\max}]}$ une trajectoire de PDMP de durée $t_{\max}$.

Flot Φ . La position X_t du PDMP suit une équation aux dérivées partielles paramétrée par le mode $m \in \mathbb{M}$ qui reste constant entre deux sauts. La fonction solution de cette équation aux dérivées partielles est notée ϕ_m . Partant de l'état $z = (x, m) \in E$, la fonction de flot définie par $\Phi_z = \Phi_{x,m} : t \mapsto (\phi_m(x, t), m)$ indique donc en l'absence de saut l'état du processus après un temps $t > 0$. Résoudre ces EDP est la partie la plus coûteuse de la simulation des PDMP qui nous intéressent et impliquent l'utilisation de puissants codes de calcul résolvant des équations physiques.

Si l'espace d'état a des frontières (notées ∂E), le processus saute lorsqu'il les atteint. Pour tout état initial $z \in E$, nous définissons $t_z^\partial := \inf\{t > 0 : \Phi_z(t) \in \partial E\} \in [0, +\infty]$ le temps d'atteinte déterministe de ∂E .

Intensité de saut λ . Le processus peut également sauter à des instants aléatoires dont la distribution est caractérisée par une intensité de saut $\lambda : E \rightarrow \mathbb{R}_+$. Plus λ donne de poids à un état $z \in E$, plus le processus a de chances de sauter lorsqu'il passe par cet état. Supposons que l'on soit dans l'état $z \in E$ à l'instant $s > 0$, on note T_z le temps d'attente aléatoire avant le prochain saut depuis l'état z . De façon analogue aux instants de sauts d'un processus de Poisson inhomogène, la fonction de survie de T_z est donnée par:

$$\mathbb{P}(T_z > t \mid Z_s = z) = \mathbb{1}_{t < t_z^\partial} \exp\left(-\int_0^t \lambda(\Phi_z(u)) \, du\right). \quad (1)$$

Noyau de saut $\mathcal{K}$. Lorsque le processus saute depuis un état $z^- \in E$, l'état d'arrivée du processus est tiré parmi les autres états selon un noyau de saut markovien $\mathcal{K}_{z^-}$ de densité $z \mapsto K(z^-, z)$ (par rapport à une certaine mesure de référence ν_{z^-} sur E). L'expression "noyau de saut" désignera dans la suite la densité K .

Densité d'une trajectoire de PDMP. Notons $\mathcal{E}$ l'ensemble des trajectoires de PDMP de durée $t_{\max}$ à valeurs dans E qui sont réalisables selon (Φ, λ, K) . La mesure de référence ζ sur $\mathcal{E}$ permettant de construire la densité de la trajectoire $\mathcal{Z}$ a été explicitée dans [5].

Soit $\mathcal{Z} = (Z_t)_{t \in [0, t_{\max}]} \in \mathcal{E}$ une trajectoire de PDMP et $\mathbf{n}(\mathcal{Z})$ son nombre de sauts (c.à.d. le nombre de sauts survenus avant l'instant $t_{\max}$). On note $z_0 \in E$ l'état initial de la trajectoire, t_0 le temps d'attente avant le premier saut, et pour $k = 1, \dots, \mathbf{n}(\mathcal{Z}) - 1$ on note z_k l'état du processus après le k -ème saut, t_k le temps d'attente entre le k -ème et le $(k+1)$ -ème saut et finalement $t_{\mathbf{n}(\mathcal{Z})} = t_{z_{\mathbf{n}(\mathcal{Z})}}^\partial = t_{\max} - \sum_{k=0}^{\mathbf{n}(\mathcal{Z})-1} t_k$ le temps d'attente entre le dernier saut et la fin de la simulation à l'instant $t_{\max}$. La densité de probabilité π du PDMP évaluée en la trajectoire $\mathcal{Z}$ s'écrit alors:

$$\pi(\mathcal{Z}) = \prod_{k=0}^{\mathbf{n}(\mathcal{Z})} [\lambda(\Phi_{z_k}(t_k))]^{\mathbb{1}_{t_k < t_{z_k}^\partial}} \times \exp\left[-\int_0^{t_k} \lambda(\Phi_{z_k}(u)) \, du\right] \times \prod_{k=0}^{\mathbf{n}(\mathcal{Z})-1} K(\Phi_{z_k}(t_k), z_{k+1}). \quad (2)$$

On suppose désormais l'espace d'états E et le flot Φ fixés. La densité π du PDMP (et donc sa distribution de probabilité) peut être décrite par le couple (λ, K) qui contient toute l'information sur l'aléa du processus.

3 Échantillonnage préférentiel optimal de PDMPs

Soit $D \subset E$ un sous-ensemble de l'espace d'états, on s'intéresse à la probabilité qu'une trajectoire $\mathcal{Z}$ atteigne la région D avant la date $t_{\max}$ sous une distribution de référence π_0 caractérisée par une intensité λ_0 et un noyau K_0 . On note $\mathcal{D} \subset \mathcal{E}$ le sous-ensemble des trajectoires possibles de durée $t_{\max}$ atteignant la région D . On souhaite donc estimer $P := \mathbb{P}_{\pi_0}(\mathcal{Z} \in \mathcal{D})$.

Évènement rare. Nous avons en tête le cas où P est très petit, c.à.d où $\{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}\}$ est un événement rare.

Une méthode de Monte-Carlo standard (CMC pour crude Monte Carlo) fournit un estimateur naturel, consistant et non biaisé de P :

$$\hat{P}_{\text{CMC}} := \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{1}_{\mathcal{Z}_k \in \mathcal{D}} \quad \text{avec } \mathcal{Z}_1, \dots, \mathcal{Z}_N \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} \pi_0. \quad (3)$$

Puisqu'il faut typiquement $O(1/P)$ simulations pour observer une réalisation d'un événement de probabilité P lorsque P est petit, il est clair qu'une méthode CMC n'est pas adaptée à l'estimation de probabilités très faibles. Plus P est petit, plus la variance de $\hat{P}_{\text{CMC}}$ est grande par rapport à sa moyenne. Nous avons donc recours à l'échantillonnage préférentiel (parfois abrégé IS pour "importance sampling"), l'une des méthodes de réduction de variance les plus populaires pour la simulation d'événements rares.

Échantillonnage préférentiel classique. L'idée est de générer la trajectoire non pas selon sa distribution originale π_0 , mais selon une distribution auxiliaire q plus susceptible de réaliser l'évènement rare, et nous corrigeons ensuite le biais en introduisant le rapport de vraisemblance $\frac{\pi_0}{q}$ dans la formule de l'estimateur. Nous supposons que $\text{supp}(q) \subset \text{supp}(\pi_0)$ (si une trajectoire est réalisable sous q , elle est réalisable sous π_0 car elles sont toutes deux des densités sur $\mathcal{E}$). On a alors :

$$\mathbb{P}_{\pi_0}(\mathcal{Z} \in \mathcal{D}) = \mathbb{E}_{\pi_0}[\mathbf{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}}] = \mathbb{E}_q \left[\mathbf{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}} \frac{\pi_0(\mathcal{Z})}{q(\mathcal{Z})} \right]. \quad (4)$$

L'estimateur d'échantillonnage préférentiel est simplement l'estimateur CMC de l'espérance dans le membre de droite de (4). Il est donc également un estimateur consistant et non biaisé de P :

$$\hat{P}_N^{\text{IS}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{1}_{\mathcal{Z}_k \in \mathcal{D}} \frac{\pi_0(\mathcal{Z}_k)}{q(\mathcal{Z}_k)} \quad \text{avec } \mathcal{Z}_1, \dots, \mathcal{Z}_N \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} q. \quad (5)$$

La variance de cet estimateur dépend du choix de q . La densité optimale $q_{\text{opt}} : \mathcal{Z} \mapsto \frac{1}{p} \mathbf{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}}, \pi_0(\mathcal{Z}) \propto \pi_0(\mathcal{Z} \mid \mathcal{Z} \in \mathcal{D})$ produit un estimateur de variance nulle, mais d’une part sa constante de normalisation est précisément la quantité que nous cherchons à estimer, d’autre part on ne sait a priori pas simuler de trajectoire $\mathcal{Z}$ directement dans $\mathcal{D}$ selon une distribution proportionnelle à π_0 .

Fonction committor. Cette densité optimale peut être caractérisée plus finement dans le cas des PDMPs. Nous avons vu que choisir une distribution d’importance q revient à choisir un couple (λ, K) . Le couple optimal $(\lambda_{\text{opt}}, K_{\text{opt}})$ correspondant à q_{opt} dépend de U_{opt} , la fonction *committor* du processus. Notion centrale en théorie des transitions de phase, la fonction committor permet traditionnellement de définir des stratégies optimales pour des méthodes dynamiques de simulation d’événements rares comme les méthodes de “splitting / subset sampling” plutôt que d’échantillonnage préférentiel. La fonction committor associée au processus stochastique $\mathcal{Z}$, à l’événement $\{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}\}$ et à la date t_{max} donne la probabilité que la trajectoire $\mathcal{Z}$ réalise l’événement $\{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}\}$ avant un instant fixé t_{max} , sachant l’état actuel de la trajectoire. Formellement, pour un état $z \in E$ et un temps $s > 0$, la fonction committor est définie comme suit :

$$U_{\text{opt}}(z, s) := \mathbb{E}_{\pi_0} [\mathbf{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}} \mid Z_s = z]. \quad (6)$$

Pour alléger les futures équations, nous définissons également une variante notée U_{opt}^- qui retourne la probabilité que la trajectoire réalise l’événement sachant son état actuel et en faisant l’hypothèse supplémentaire qu’elle saute à cet instant. Pour tout état de départ $z^- \in E$ et instant $s > 0$, on a :

$$U_{\text{opt}}^-(z^-, s) := \int_E U_{\text{opt}}(z, s) K_0(z^-, z) d\nu_{z^-}(z). \quad (7)$$

Intensité et noyau de saut optimaux. L’expression de l’intensité de saut optimale λ_{opt} et du noyau de saut optimal K_{opt} permettant de construire un estimateur de variance nulle ont été décrits dans [5] et sont donnés par :

$$\lambda_{\text{opt}}(\Phi_z(t); s) = \lambda_0(\Phi_z(t)) \times \frac{U_{\text{opt}}^-(\Phi_z(t), s+t)}{U_{\text{opt}}(\Phi_z(t), s+t)}, \quad (8)$$

$$K_{\text{opt}}(z^-, z; s) = K_0(z^-, z) \times \frac{U_{\text{opt}}(z, s)}{U_{\text{opt}}^-(z^-, s)}. \quad (9)$$

- L’équation (8) peut s’interpréter de la façon suivante : si le processus est k fois plus susceptible de réaliser l’événement en sautant maintenant dans l’état z que plus tard, alors l’intensité de saut optimale λ_{opt} évaluée en z vaut k fois l’intensité de saut nominale λ_0 en ce point.
- L’équation (9) quant à elle nous dit que, si en sautant maintenant depuis l’état z^- , le processus est k fois plus susceptible de réaliser l’événement en atterrissant dans l’état

spécifique z plutôt qu'en sautant au hasard selon K_0 , alors le noyau de saut optimal K_{opt} vaut k fois le noyau de saut K_0 en ces points.

Par conséquent, connaître U_{opt} est suffisant pour construire q_{opt} et donc un estimateur optimal de P . En pratique, la fonction committor U_{opt} n'est pas connue mais peut être approchée. La méthode d'entropie croisée (présentée en section 5) permet d'améliorer séquentiellement notre densité d'importance à partir d'une famille paramétrique d'approximations de U_{opt} . Le défi est donc de déterminer une bonne famille de candidats pour approcher U_{opt} .

4 Approximation de fonction committor sur graphe

Dire que l'événement $\{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}\}$ est rare, c'est dire que la région D est peu visitée. On note $\mathbb{M}_D$ l'ensemble des modes qui permettent d'accéder à D : $\mathbb{M}_D = \{m \in \mathbb{M} \mid \exists x \in \mathbb{X} : (x, m) \in D\}$. Puisque l'aléa vient des sauts (et non pas de la dynamique continue), on cherche à construire une approximation de U_{opt} qui accorde davantage de poids à un état $z = (x, m)$ lorsque m est "proche" des modes de $\mathbb{M}_D$. Il nous reste à préciser cette notion de proximité.

Marche aléatoire sur un graphe. Tout d'abord remarquons que le processus $(M_t)_{t \in [0, t_{\max}]}$ est une marche aléatoire (inhomogène et pas forcément markovienne) à temps continu sur un graphe dont les sommets sont les modes de $\mathbb{M}$. Deux sommets $m, m' \in \mathbb{M}$ sont connectés si et seulement s'il existe $x, x' \in \mathbb{X}$ tels que $K((x, m), (x', m')) > 0$. On peut tenir compte de cette structure pour construire notre score de proximité entre un mode m et l'ensemble $\mathbb{M}_D$. La distance usuelle sur un graphe (longueur du plus court chemin reliant m et un mode de $\mathbb{M}_D$) est sans doute trop pauvre pour valoriser les modes qui ont de nombreuses voies d'accès vers $\mathbb{M}_D$.

Soit $\tilde{\mathcal{Z}}$ un PDMP sur E sans saut déterministe aux frontières et dont l'intensité $\tilde{\lambda}$ et $\tilde{K}$ ne dépendent pas de la position. Le PDMP $\tilde{\mathcal{Z}}$ est alors une marche aléatoire markovienne homogène en temps sur $\mathbb{M}$. Cette propriété de Markov homogène en temps permet de calculer explicitement le temps moyen d'atteinte de $\mathbb{M}_D$ pour la marche aléatoire $\tilde{\mathcal{Z}}$ depuis tout mode de départ $m \in \mathbb{M}$. Pour cela on définit le générateur $\tilde{Q}$ de la marche aléatoire comme la matrice $[\tilde{Q}_{m,m'}]_{m,m' \in \mathbb{M}}$ vérifiant : $\tilde{Q}_{m,m'} = \tilde{K}(m, m')$ pour $m \neq m'$ ($\tilde{K}$ est indépendant de $x, x' \in \mathbb{X}$) et $\tilde{Q}_{m,m} = -\sum_{m' \in \mathbb{M} \setminus \{m\}} \tilde{Q}_{m,m'}$. On note $\tau_m(\mathbb{M}_D)$ le temps d'atteinte de $\mathbb{M}_D$ en suivant la marche aléatoire $\tilde{\mathcal{Z}}$ depuis le mode m et $\bar{\tau}_m(\mathbb{M}_D) = \mathbb{E}[\tau_m(\mathbb{M}_D)]$ sa valeur moyenne. Le vecteur $[\bar{\tau}_m(\mathbb{M}_D)]_{m \in \mathbb{M}_D}$ est solution du système linéaire suivant :

$$\begin{cases} -\sum_{m' \in \mathbb{M}} \tilde{Q}_{m,m'} \bar{\tau}_{m'}(\mathbb{M}_D) = 1 & \text{si } m \notin \mathbb{M}_D, \\ \bar{\tau}_m(\mathbb{M}_D) = 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (10)$$

Puisque le PDMP $\mathcal{Z}$ d'intensité λ_0 et noyau K_0 n'est a priori pas homogène en temps, on en détermine une version simplifiée $\tilde{\mathcal{Z}}$ vérifiant cette condition d'homogénéité. Choisir "naïvement" $\tilde{\mathcal{Z}}$ comme la marche aléatoire simple à temps continu sur $\mathbb{M}$ ($\tilde{K}$ a le même

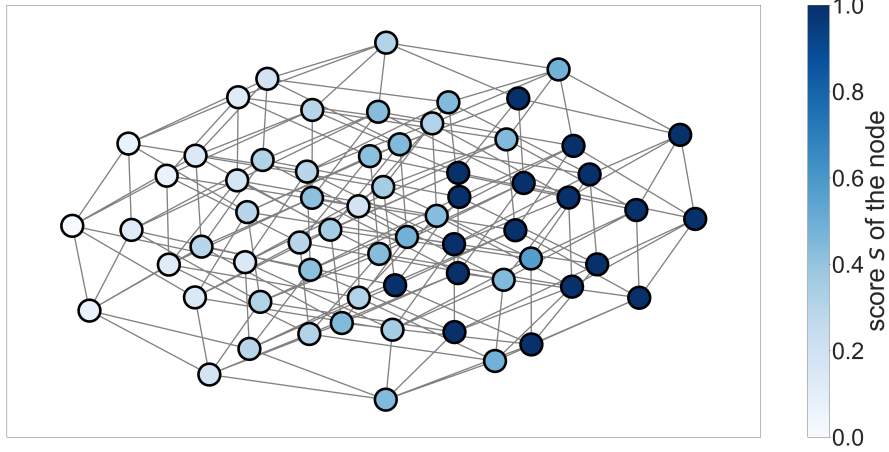


Figure 1: **Exemple de scores pour un graphe à 64 sommets.** L'ensemble $\mathbb{M}_D$ correspond aux sommets les plus foncés et on effectue une marche aléatoire simple.

support que K_0 et le mode d'arrivée après chaque saut est choisi uniformément parmi les modes voisins du mode de départ) donne déjà de très bons résultats. L'idéal reste de fournir l'intensité $\tilde{\lambda}$ constante par mode la plus proche possible de λ_0 .

Une fois déterminé le vecteur $[\bar{\tau}_m(\mathbb{M}_D)]_{m \in \mathbb{M}_D}$ pour la marche aléatoire $\tilde{\mathcal{Z}}$, on convertit ces temps moyens d'atteinte en un score de proximité de chaque mode à l'ensemble $\mathbb{M}_D$. Pour tout $m \in \mathbb{M}$ on définit le score :

$$\rho_m = 1 - \frac{\bar{\tau}_m(\mathbb{M}_D)}{\max_{m' \in \mathbb{M}} \{\bar{\tau}_{m'}(\mathbb{M}_D)\}}. \quad (11)$$

Le score des modes dans $\mathbb{M}_D$ vaut 1, et plus la marche aléatoire met de temps en moyenne pour atteindre $\mathbb{M}_D$ depuis l'état m , plus ρ_m est proche de 0 (exemple représenté en figure 1).

Famille d'approximations de U_{opt} . Nous cherchons à présent à construire une famille de fonctions du score du mode :

- paramétrée par un vecteur réel $\alpha \in \mathbb{A} \subset \mathbb{R}^{d_\alpha}$ (avec $d_\alpha \in \mathbb{N}^*$) pour faciliter la recherche de son meilleur représentant lors de la procédure d'entropie croisée,
- dont la dimension d_α n'est pas imposée par le graphe (il y a $|\mathbb{M}|$ degrés de liberté possibles mais la famille peut être suffisamment flexible avec beaucoup moins de paramètres).

On choisit la dimension d_α et on considère la famille paramétrique suivante :

$$U_\alpha((x, m), s) = \exp(\alpha_{\lfloor \rho_m d_\alpha \rfloor} \times \rho_m), \quad (12)$$

pour tout état $z = (x, m)$ et tout instant $s > 0$. Il s'agit de l'exponentielle d'une fonction linéaire par morceaux dont les pentes $\alpha_1, \dots, \alpha_{d_\alpha}$ changent en fonction de la valeur de ρ_m . D'autres choix sont possibles et seront étudiés ultérieurement.

On dispose à présent d'une famille de distributions instrumentales $(q_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{A}}$ d'intensités et de noyaux de sauts inspirés par (8) et (9) :

$$\lambda_\alpha(\Phi_z(t); s) = \lambda_0(\Phi_z(t)) \times \frac{U_\alpha^-(\Phi_z(t), s+t)}{U_\alpha(\Phi_z(t), s+t)}, \quad (13)$$

$$K_\alpha(z^-, z; s) = K_0(z^-, z) \times \frac{U_\alpha(z, s)}{U_\alpha^-(z^-, s)}. \quad (14)$$

5 Optimisation séquentielle par entropie croisée

Nous souhaitons échantillonner nos trajectoires selon la distribution la plus proche possible de q_{opt} . En rappelant que $q_{\text{opt}}(\mathcal{Z}) = \frac{1}{P} \mathbb{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}} \pi_0(\mathcal{Z})$, déterminer le membre de la famille $(q_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{A}}$ qui minimise la divergence de Kullback-Leibler avec la distribution cible q_{opt} peut se reformuler de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \arg \min_{\alpha \in \mathbb{A}} \mathcal{D}_{\text{KL}}(q_{\text{opt}} \| q_\alpha) &= \arg \min_{\alpha \in \mathbb{A}} \mathbb{E}_{q_{\text{opt}}} \left[\log \left(\frac{q_{\text{opt}}(\mathcal{Z})}{q_\alpha(\mathcal{Z})} \right) \right] \\ &= \arg \min_{\alpha \in \mathbb{A}} \mathbb{E}_{\pi_0} [-\mathbb{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}} \log(q_\alpha(\mathcal{Z}))]. \end{aligned} \quad (15)$$

La minimisation de cette dernière espérance à l'aide d'approximations successives par échantillonnage préférentiel est appelée procédure d'entropie croisée [6].

Algorithme séquentiel. La fonction $\alpha \mapsto \mathbb{E}_{\pi_0} [-\mathbb{1}_{\mathcal{Z} \in \mathcal{D}} \log(q_\alpha(\mathcal{Z}))]$ est d'abord estimée par échantillonnage préférentiel selon une distribution initiale $q_{\alpha^{(1)}}$. On détermine ensuite $\alpha^{(2)}$ qui minimise cette fonction estimée et on répète le schéma. Pour économiser des simulations, on peut recycler toutes les trajectoires simulées lors des itérations précédentes à la fois pour déterminer $\alpha^{(l+1)}$ à chaque étape de minimisation mais aussi pour produire l'estimateur final de P . En somme, à l'itération $l \in \mathbb{N}^*$:

1. **Simulation.** Générer un échantillon de n_l trajectoires $\mathcal{Z}_1^{(l)}, \dots, \mathcal{Z}_{n_l}^{(l)} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} q_{\alpha^{(l)}}$.
2. **Optimisation.** Mettre à jour le paramètre de la distribution instrumentale q_α avec les échantillons $\left(\mathcal{Z}_k^{(1)}\right)_{k=1}^{n_1}, \dots, \left(\mathcal{Z}_k^{(l)}\right)_{k=1}^{n_l}$:

$$\alpha^{(l+1)} = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{A}} \left\{ - \sum_{r=1}^l \sum_{k=1}^{n_r} \mathbb{1}_{\mathcal{Z}_k^{(r)} \in \mathcal{D}} \frac{\pi_0(\mathcal{Z}_k^{(r)})}{q_{\alpha^{(r)}}(\mathcal{Z}_k^{(r)})} \log [q_\alpha(\mathcal{Z}_k^{(r)})] \right\}. \quad (16)$$

On pose $N_L = \sum_{l=1}^L n_l$. À l'itération finale L , nous estimons P en recyclant tous les échantillons passés :

$$\hat{P}_{N_L} = \frac{1}{N_L} \sum_{l=1}^L \sum_{k=1}^{n_l} \mathbb{1}_{\mathcal{Z}_k^{(l)} \in \mathcal{D}} \frac{\pi_0(\mathcal{Z}_k^{(l)})}{q_{\alpha^{(l)}}(\mathcal{Z}_k^{(l)})}. \quad (17)$$

Intervalle de confiance asymptotique. La variance asymptotique de l'estimateur $\hat{P}_{N_L}$ peut être estimée par :

$$\hat{\sigma}_{N_L}^2 = \frac{1}{N_L} \sum_{l=1}^L \sum_{k=1}^{n_l} \mathbb{1}_{\mathcal{Z}_k^{(l)} \in \mathcal{D}} \frac{\pi_0(\mathcal{Z}_k^{(l)})^2}{q_{\alpha^{(l)}}(\mathcal{Z}_k^{(l)})^2} - \hat{P}_{N_L}^2. \quad (18)$$

Sous les hypothèses du théorème 3.3 de [3] et en notant $q_{1-a/2}$ le $(1 - a/2)$ -quantile de la loi $\mathcal{N}(0, 1)$ on a :

$$\mathbb{P} \left(P \in \left[\hat{P}_{N_L} - q_{1-a/2} \hat{\sigma}_{N_L} N_L^{-1/2}, \hat{P}_{N_L} + q_{1-a/2} \hat{\sigma}_{N_L} N_L^{-1/2} \right] \right) \longrightarrow 1 - a. \quad (19)$$

6 Résultats numériques

Nous testons notre méthode Adaptive Importance Sampling (AIS) sur un cas test issu de l'industrie nucléaire : la piscine de combustible nucléaire usagé décrite dans [4]. L'événement rare dont on veut estimer la probabilité est la défaillance du système qui se produit lorsque le niveau d'eau dans la piscine descend en dessous d'un seuil critique. Le graphe généré par les modes de ce système possède 32 768 sommets. Nous comparons notre méthode AIS à une méthode Monte-Carlo standard massive (CMC) dans les mêmes conditions que dans [3]. On représente l'estimateur, le coefficient de variation réduit et l'intervalle de confiance obtenus pour différentes tailles d'échantillons dans le tableau 1, et on compare 15 intervalles de confiance obtenus avec la méthode AIS à l'intervalle de confiance CMC le plus précis dont on dispose (avec des échantillons de taille 10^7) dans la figure 2.

Method	N	Estimated probability $\hat{P}$	Coeff. of var.	95% confidence interval
CMC	10^5	2×10^{-5}	223.60	$[0; 4.77 \times 10^{-5}]$
	10^6	1.3×10^{-5}	277.35	$[5.93 \times 10^{-6}; 2.01 \times 10^{-5}]$
	10^7	1.77×10^{-5}	237.68	$[1.51 \times 10^{-5}; 2.03 \times 10^{-5}]$
AIS	10^2	2.29×10^{-5}	2.28	$[1.27 \times 10^{-5}; 3.32 \times 10^{-5}]$
	10^3	1.86×10^{-5}	1.62	$[1.67 \times 10^{-5}; 2.04 \times 10^{-5}]$
	10^4	2.01×10^{-5}	0.86	$[1.98 \times 10^{-5}; 2.05 \times 10^{-5}]$

Table 1: **Comparaison entre CMC et AIS sur le système SFP.** Le coefficient de variation réduit est défini par $\hat{\sigma}_N / \hat{P}_N$ avec $\hat{\sigma}_N$ de l'équation 18 et $\hat{P}_N$ de l'équation 17. On constate que l'intervalle de confiance obtenu avec 10^3 simulations sur l'AIS est déjà meilleur que l'intervalle de confiance CMC avec 10^7 simulations.

Bibliographie

- [1] Bucklew, J. A., & Bucklew, J. (2004). *Introduction to rare event simulation (Vol. 5)*. New York: Springer.

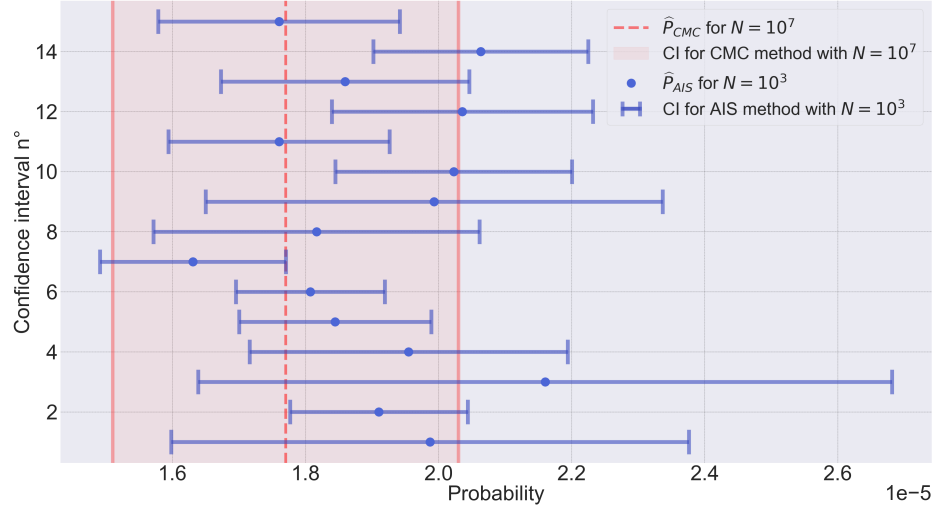


Figure 2: **Comparaison de 15 intervalles de confiance d’une méthode AIS à 10^3 simulations vs l’intervalle de confiance CMC à 10^7 simulations.** La méthode est robuste en pratique. On a bien une réduction de variance d’ordre 10 000.

- [2] Chen, H., & Zhang, F. (2008). The expected hitting times for finite Markov chains. *Linear Algebra and its Applications*, 428(11-12), 2730-2749.
- [3] Chennetier, G., Chraïbi, H., Dutfoy, A., & Garnier, J. (2022). Adaptive importance sampling based on fault tree analysis for piecewise deterministic Markov process. *arXiv preprint arXiv:2210.16185*.
- [4] Chraïbi, H., Houbedine, J. C., & Sibler, A. (2016). Pycatshoo: Toward a new platform dedicated to dynamic reliability assessments of hybrid systems. In *Proceedings of 13th international conference on probabilistic safety assessment and management (PSAM), Seoul, South Korea, October 2016*.
- [5] Chraïbi, H., Dutfoy, A., Galtier, T., & Garnier, J. (2019). On the optimal importance process for piecewise deterministic markov process. *ESAIM: Probability and Statistics*, 23, 893-921.
- [6] De Boer, P. T., Kroese, D. P., Mannor, S., & Rubinstein, R. Y. (2005). A tutorial on the cross-entropy method. *Annals of operations research*, 134(1), 19-67.
- [7] Dufour, F., de Saporta, B., & Zhang, H. (2015). *Numerical methods for simulation and optimization of piecewise deterministic Markov processes: application to reliability*. John Wiley & Sons.
- [8] Rudnicki, R., & Tyran-Kaminska, M. (2015). Piecewise deterministic Markov processes in biological models. In *Semigroups of Operators-Theory and Applications: Bedlewo, Poland, October 2013 (pp. 235-255)*. Springer International Publishing.