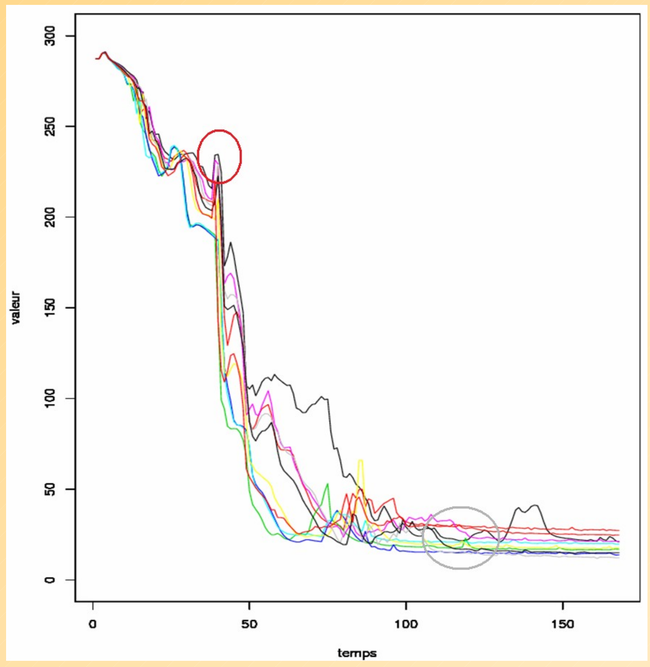
Métamodèles fonctionnels pour Codes de Calcul Physiques

B. Auder

CEA/DEN/CAD/DER/SESI/LCFR -- UPMC Paris 6

CODE DE CALCUL A ENTREES SCALAIRES ET SORTIES FONCTIONNELLES

$$\begin{pmatrix} x_1 = (x_{11}, \dots, x_{1p}) \\ \vdots \\ x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip}) \\ \vdots \\ x_N = (x_{N1}, \dots, x_{Np}) \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \vdots \\ y_i(t) \\ \vdots \\ y_N(t) \end{pmatrix}$$



Caractéristiques (très) intéressantes [ovale rouge]

..et probablement moins vitales [ovale gris]

Comment les déterminer / classer automatiquement ?

→Avis d'expert, et / ou :
→ Tests statistiques, lissage, leave-one-out ..etc

PROPAGATION DES INCERTITUDES

Incertitudes sur les paramètres (entrées du code) ⇒ Incertitudes sur la sortie du code de calcul

Problématiques :

- Quels sont les paramètres les plus influents ? (C.-à-d. ceux dont la variabilité entraîne les plus fortes oscillations du résultat)
  ANALYSE DE SENSIBILITE

Comment la variabilité des entrées se répercute sur la sortie du code de calcul ? Incertitude au final sur la sortie ?
Estimation de la marge de confiance sur la prise de décision ?
PROPAGATION D'INCERTITUDES

➔Analyses difficiles si code **f** trop lent, donc :
Construction d'un ***métamodèle* Φ** (validé par leave-one-out par exemple, le plus fidèle possible) :

$$\phi : x \in \mathbb{R}^p \mapsto y_x(t) \in \mathcal{F}([a,b], \mathbb{R}),$$

Supposant hypothèses de régularité sur f, et :

$x_1, \dots, x_N$; $y_{x_1} = f(x_1), \dots, y_{x_N} = f(x_N)$ connus

CONSTRUCTION DU METAMODELE EN 3 PHASES

I) Classement des courbes en groupes de similarité

⇒ - Facilite l'apprentissage (réduction de la complexité)
- Améliore l'interprétation du modèle final

Inconvénient : nécessite un classement (supervisé) des entrées correspondantes avec marge d'erreur associée

II) Réduction de la dimension :

- Approximation des fonctions par projection sur une base
  ➔ Double effet : lissage, et passage dans $\mathbf{R}^d$
  → Donc très intéressant si courbes bruitées

Ou :

- Simplification directe des fonctions sur certaines zones pré-déterminées, au second plan dans les études de courbes.

Ou *rien*, auquel cas : métamodèle long à construire, corrélations inter-courbes difficiles à prendre en compte.

III) Reconstitution, prédiction

Apprentissage statistique sur les coefficients de décomposition :
Étape classique avec de nombreuses solutions proposées.

Etape I : *Définition d'une distance pertinente ?*
Clustering spectral assez efficace ; alternatives : k-Means, algorithme E-M, clustering hiérarchique ..etc

Etape II : *Comment relier le pouvoir explicatif d'une base au taux de mauvais classement attendu ?*
Bases : ACP, splines, ondelettes ..etc

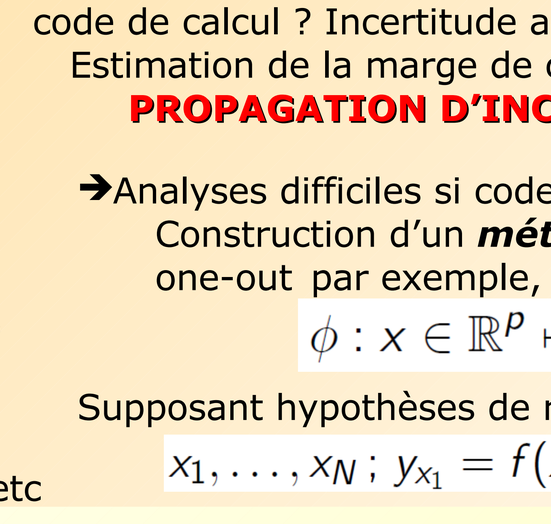
Etape III : SVM, processus gaussiens, réseaux de neurones, bases de splines, boosting ..etc (ou ..)

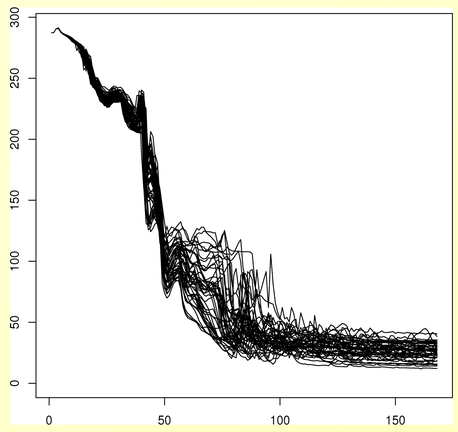
Conclusion :
Beaucoup de travail à faire sur les points 1 et 2
→ **Nombre optimal de clusters ?**
→ ***Impact d'une erreur de classification ?***
→ **Base de fonction optimale ?**

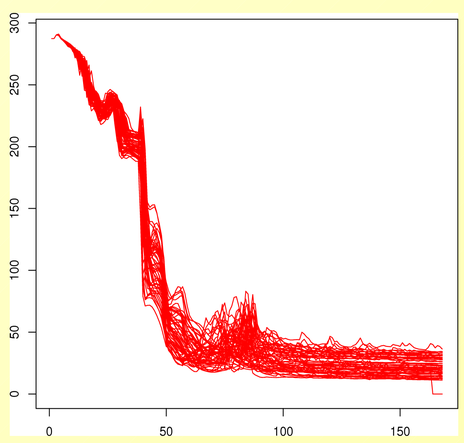
En cours :
- tests d'heuristiques pour le nombre de clusters
- tentative de généraliser l'ACP fonctionnelle

p = 4, d = 3 ; 100 courbes dont 48 dans un cluster, 52 dans l'autre.

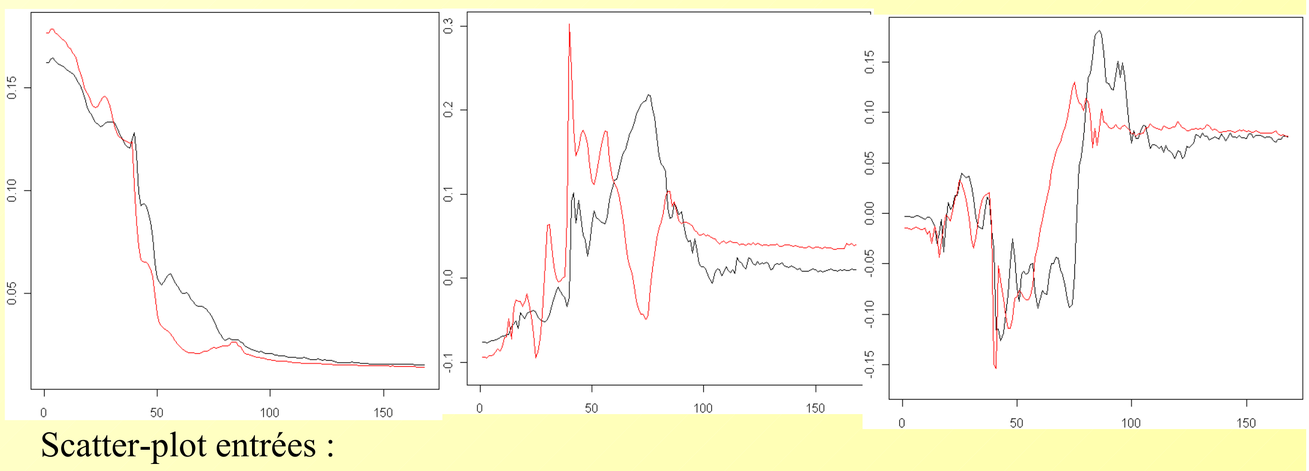
Cas général : *comment déterminer le nombre de groupes ?*



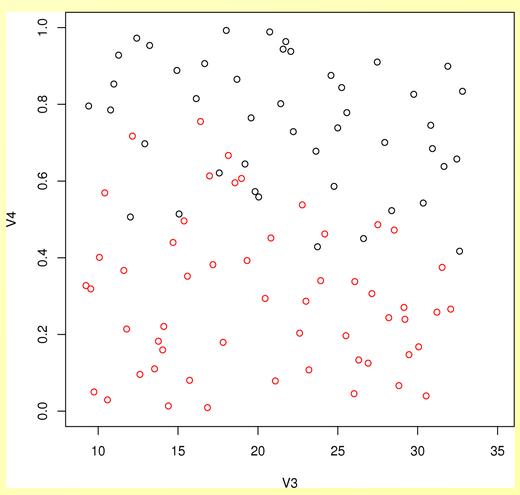




Premières fonctions de base ACP :
(+90% de variabilité expliquée)

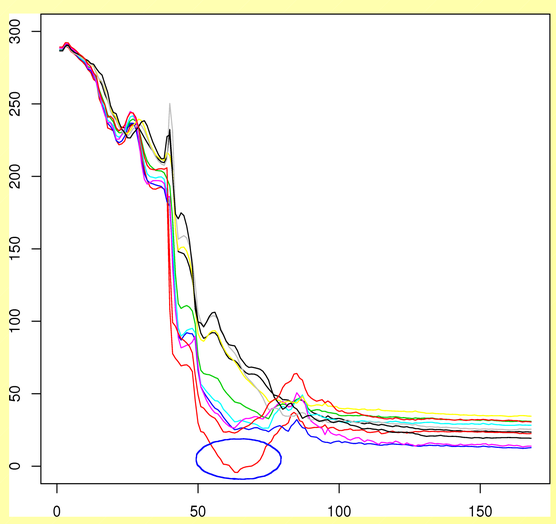


Scatter-plot entrées :
Composante 3 vs. 4



➔Arbre de décision bien adapté, taux d'erreur < 10% . *Suffisant ?*

Quelques courbes prédites :



Zone entourée en bleu : probablement une mauvaise classification de l'entrée à prédire.