

L'algorithme WSP et ses variantes : une approche performante pour une sélection de points efficiente et ciblée

Pr. Magalie CLAEYS-BRUNO

Aix-Marseille Université





1. DOE – Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP adaptatif

2.3 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning

1. DOE - Généralités



2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP adaptatif

2.3 Algorithme WSP protégé

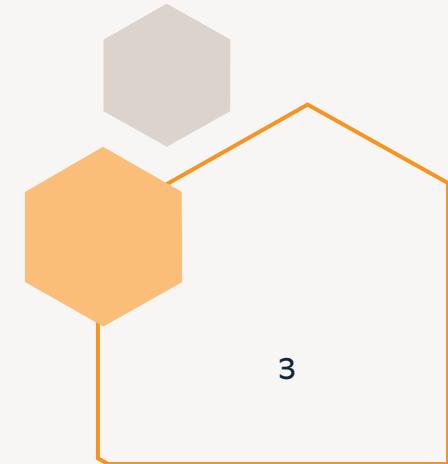
2.3 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

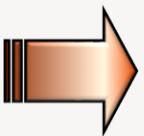
3.2 Deep learning



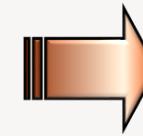
1. DOE - Généralités



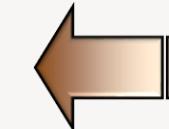
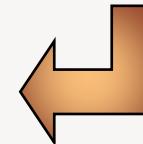
Expériences



Information



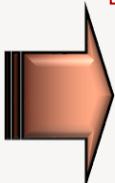
Décision



Le risque dépend de la qualité de l'information

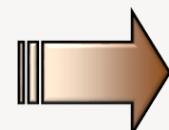
La qualité de l'information dépend des conditions expérimentales : Elle dépend de la position des points dans l'espace des variables et non des résultats expérimentaux

Et pas non plus du nombre d'expériences !



Planification expérimentale

Les plans d'expériences peuvent être définis comme des stratégies qui permettent d'organiser les expériences de telle sorte que l'information soit obtenue aussi efficacement et précisément que possible avec un minimum d'expériences



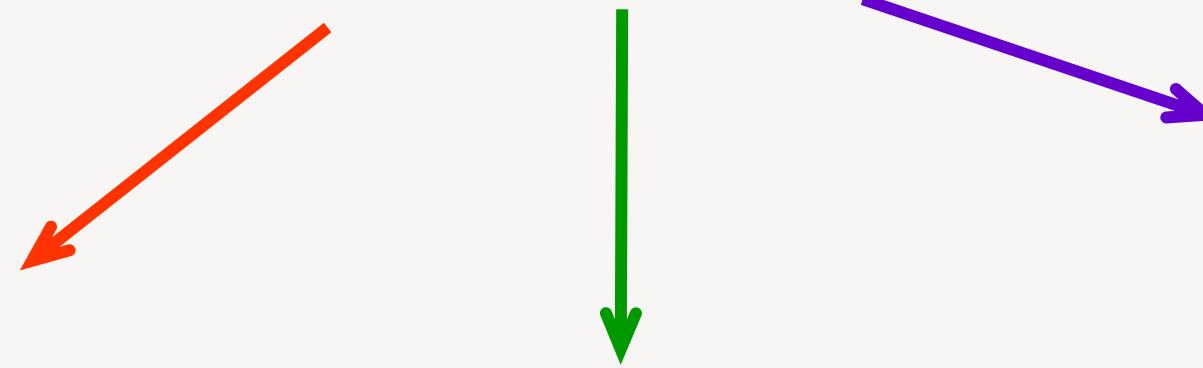
Un modèle mathématique $Y = f(X_i)$





Choisir un ensemble d'expériences conformément

AUX OBJECTIFS



Criblage de facteurs

Rechercher rapidement, parmi un ensemble de facteurs potentiellement influents, ceux qui le sont effectivement

$$\text{Var } (B) = (X'X)^{-1} \sigma^2$$

Etude quantitative de facteurs

Etudier les facteurs retenus d'une façon plus fine : interactions possibles entre les différents facteurs

Optimisation
Rechercher l'optimum d'une ou plusieurs réponses expérimentales pour un process ou une formule

$$\text{var } (y_{\text{calc},A}) = \text{var } (x'_A B)$$

$$= x'_A (X'X)^{-1} x_A s^2$$



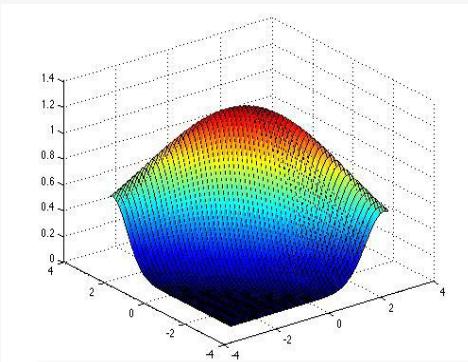
Plan d'expériences adéquat !



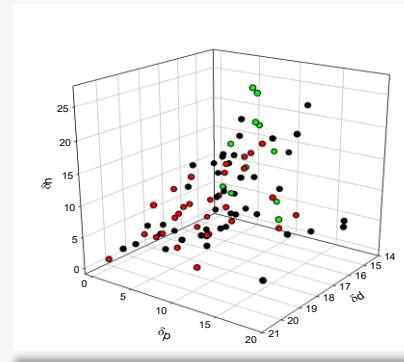
1. DOE : généralités



Expériences numériques



Surfaces de réponse complexes



QSAR/QSPR
Points candidats

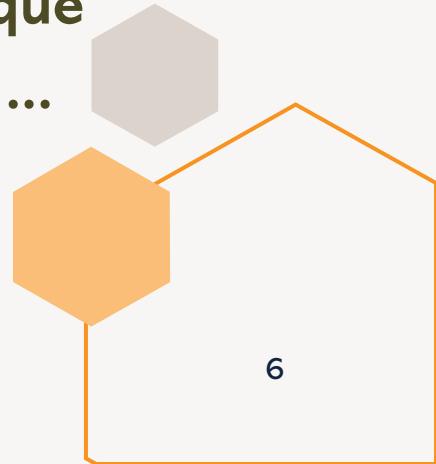


Machine learning

- ➔ Grand nombre de paramètres ($k > 100$)
- ➔ Large domaine de variation
- ➔ Phénomène complexe : Surface de réponses chaotique
- ➔ Echantillonnage, choix dans un ensemble candidat, ...



Plans d'expériences spécifiques



1. DOE - Généralités



2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP adaptatif

2.3 Algorithme WSP protégé

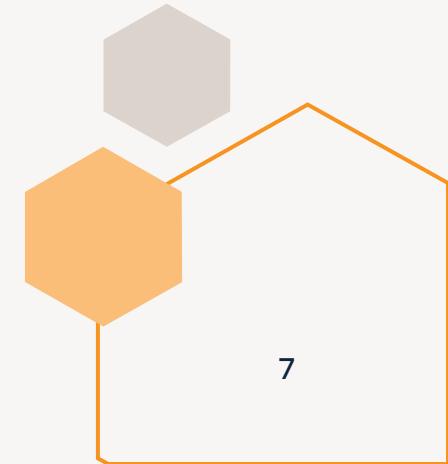
2.3 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning



2. Les plans uniformes

SFD : Space Filling Design

Un plan d'expériences uniforme (Space-Filling Design, SFD) a la particularité de répartir les points expérimentaux uniformément dans le domaine de variation des variables d'entrée



Critères pour caractériser l'uniformité d'un plan :

→ La **discrépancy** : mesure l'**écart** entre une distribution empirique de points donnée et une distribution théorique de points uniforme ↗

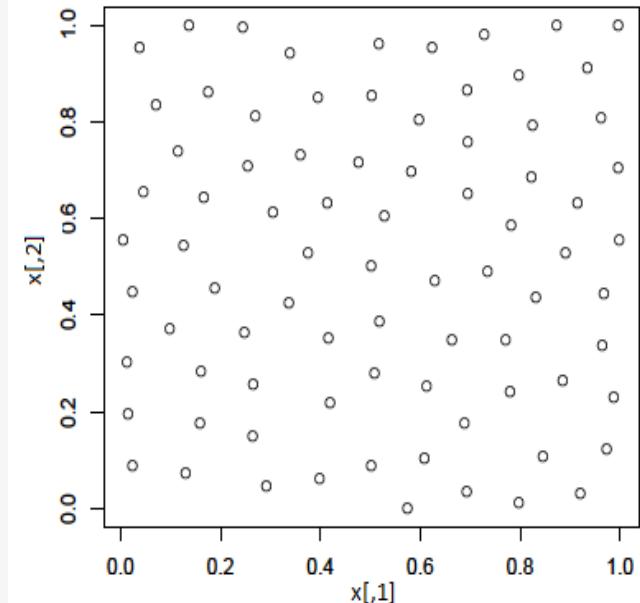
→ La **distance minimale**, **Mindist** : valeur minimale des distances minimales entre 2 points ↗

$$\text{MinDist} = \min_{x_i \in X} \min_{\substack{x_k \in X \\ k \neq i}} \text{dist}(x^i, x^k)$$

→ La **moyenne des distances minimales**, **Moydist** : valeur moyenne des distances minimales

→ La **mesure de recouvrement**, **Cov** : coefficient de variation des distances minimales ↗

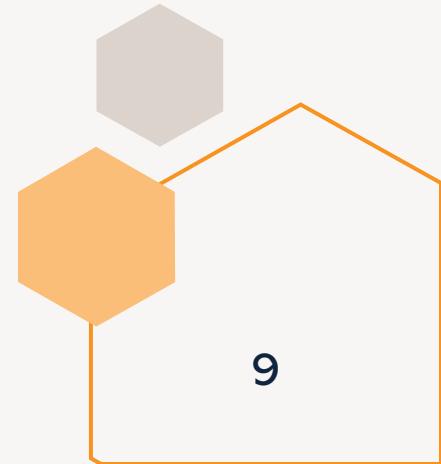
$$\text{Cov} = \frac{1}{\gamma} \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n (\gamma_i - \bar{\gamma})^2 \right)^{1/2} \quad \gamma_i = \min_{k \neq i} \text{dist}(x^i, x^k) \quad \bar{\gamma} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \gamma_i$$



2. Les plans uniformes

Quelques space-filling designs

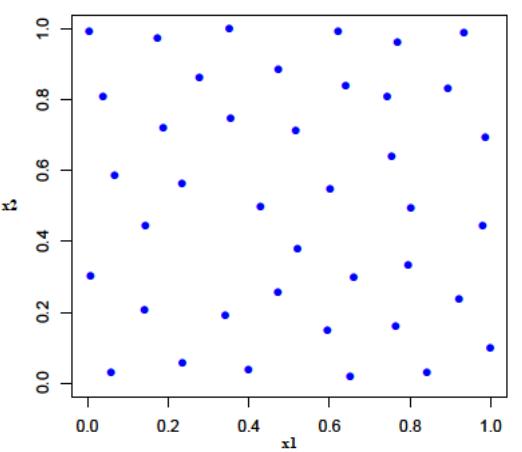
- **Hypercubes Latins** : *Random LHS, Maximin LHS, Improved LHS*
critère de projection
- **Suite à faible discrépance** : *Halton, Hammersley, Faure, Sobol, ...*
- **Plans Minimax** : *distance maximale entre 2 points*
- **Plans Dmax** : *entropie maximale*
- **Plans de Strauss** : *principe de répulsion*



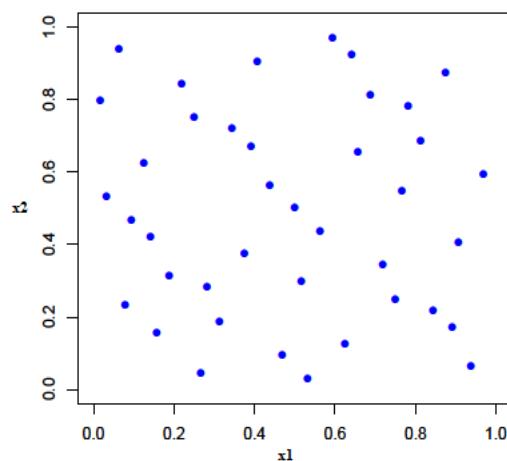
2. Les plans uniformes

Quelques plans uniformes N = 40 en 2D

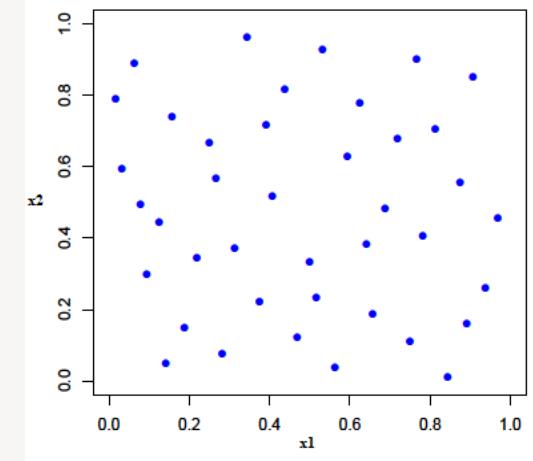
Plan de Strauss



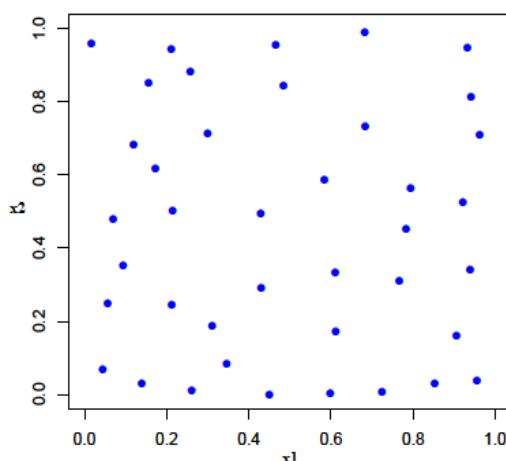
Suite de Faure



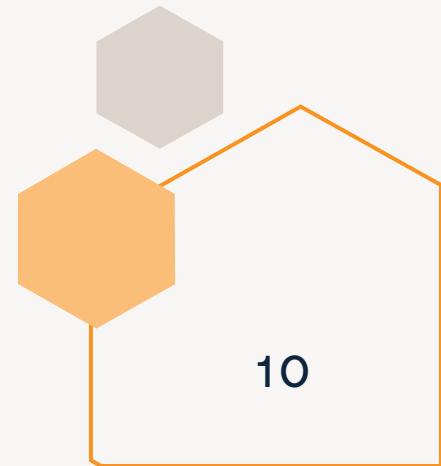
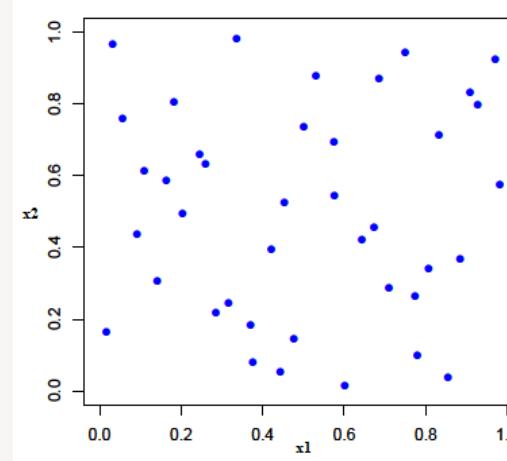
Suite de Halton



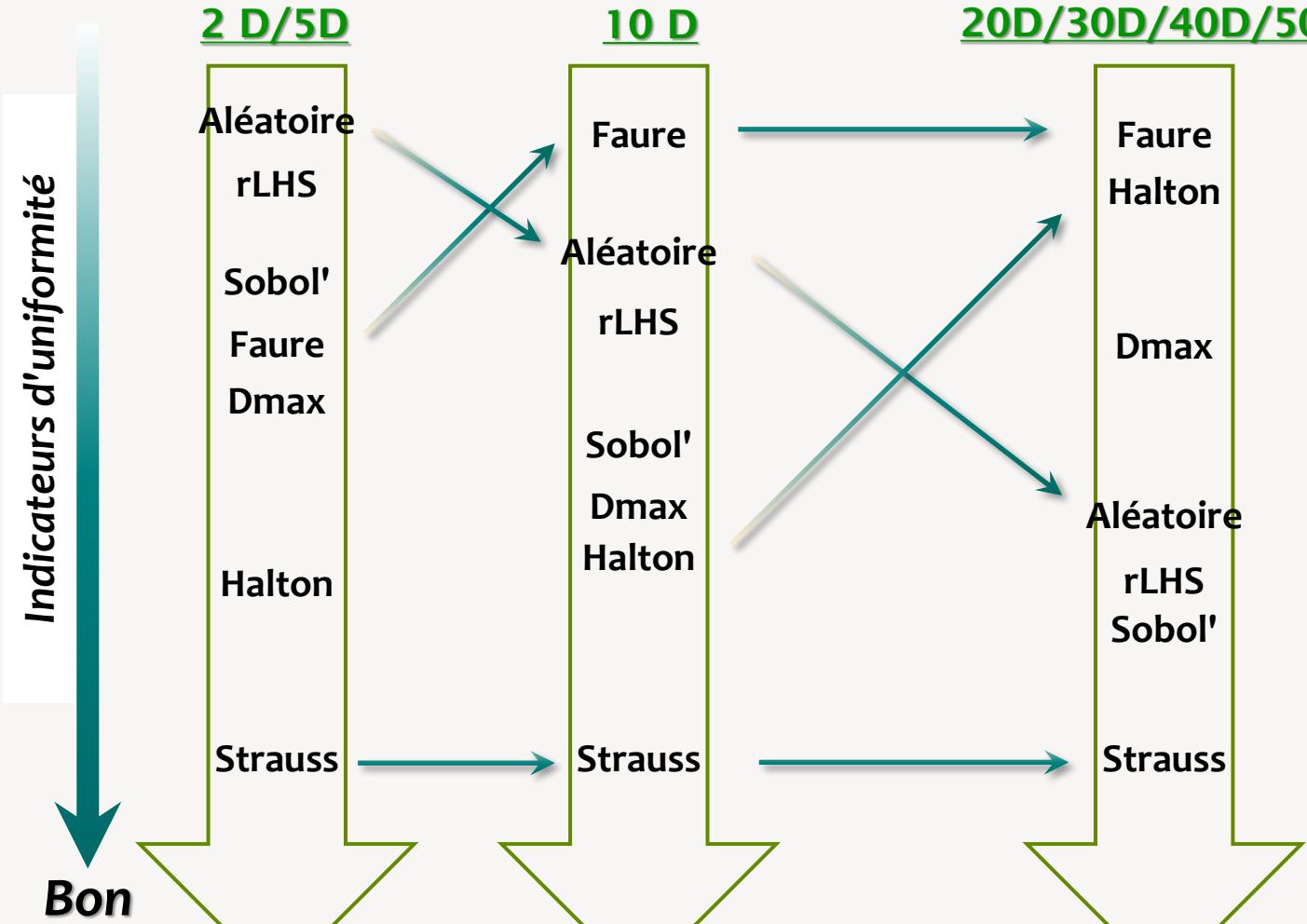
Plan Dmax



Hypercube latin aléatoire

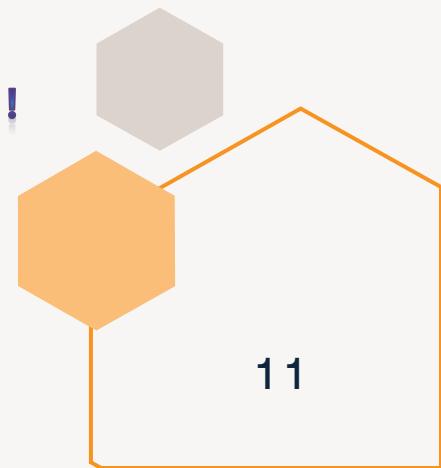
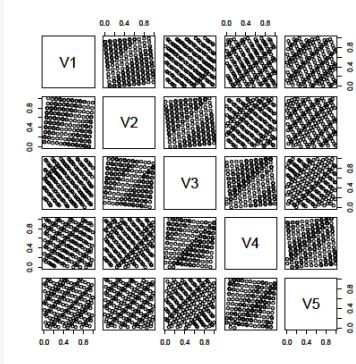


2. Les plans uniformes



- Certains plans SFD n'existent pas,
- Temps de construction très long,
- Répartition non uniforme (clusters, lacunes, alignements, ...)

LA MALÉDICTION DES GRANDES DIMENSIONS !

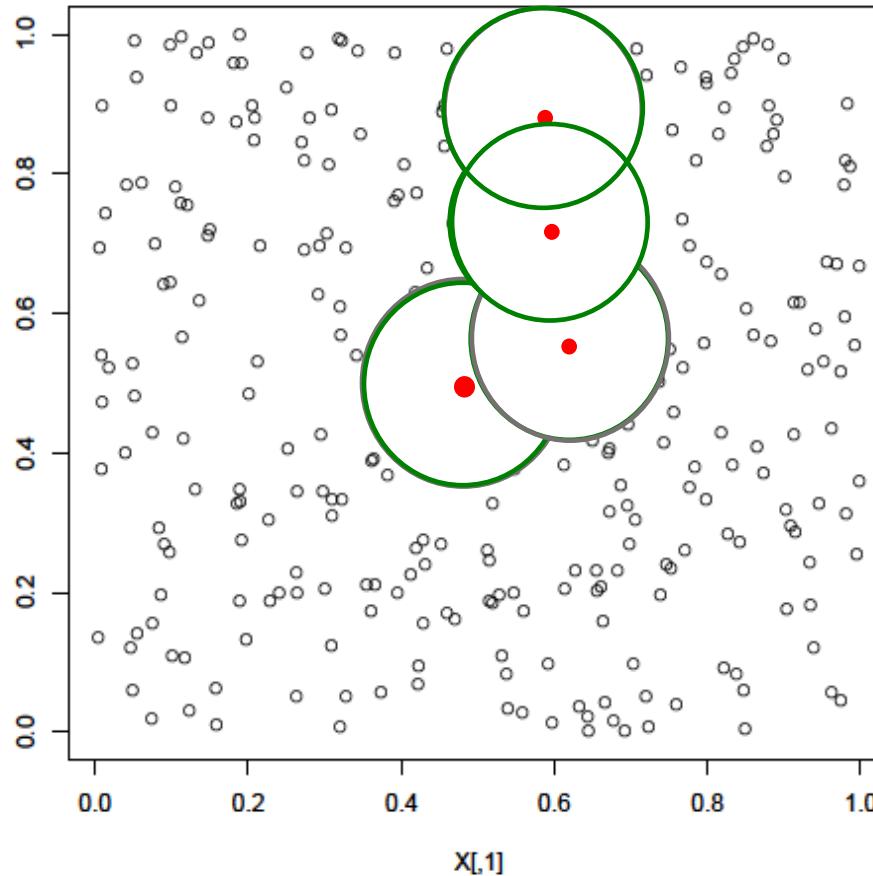
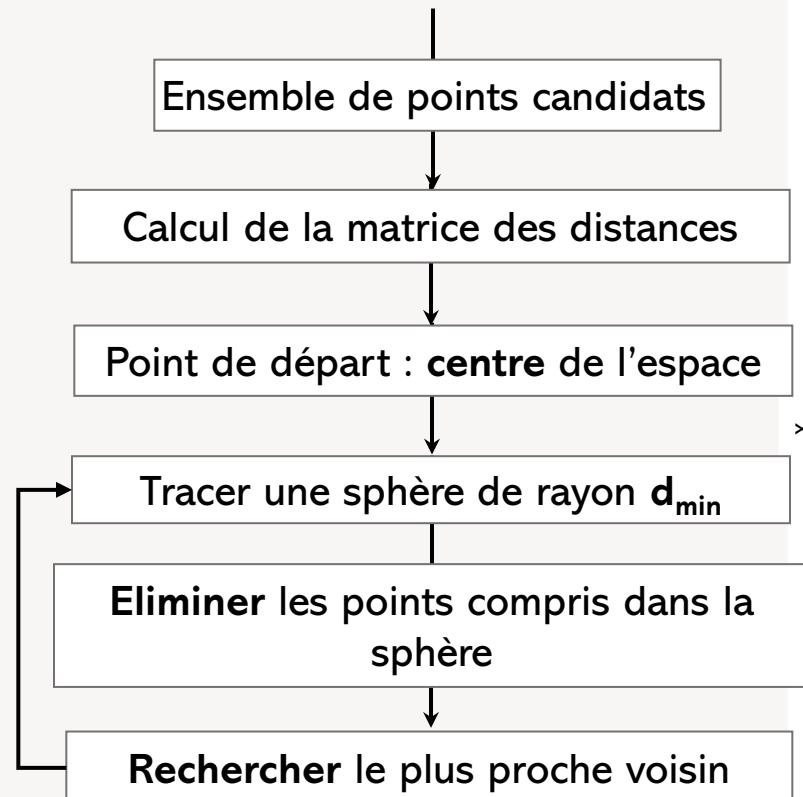


- Maximiser la valeur du **Mindist** et du **Moydist** pour ne pas avoir d'amas , et
- Minimiser la valeur **Cov** pour avoir une répartition homogène.

2.1 Algorithme WSP (Wootton, Sergent, Phan-Tan-Luu)

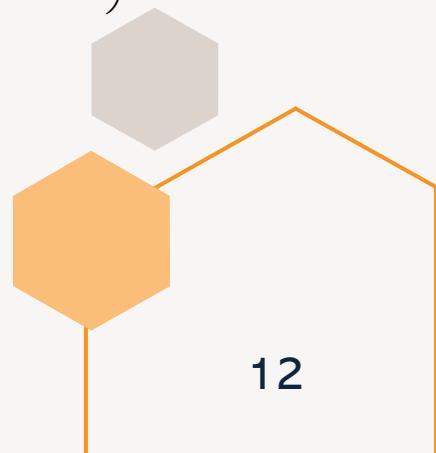
→ **Algorithme de construction de plans uniformes basé sur les distances euclidiennes**

1 seul paramètre à régler : la distance minimale entre deux points (dmin)

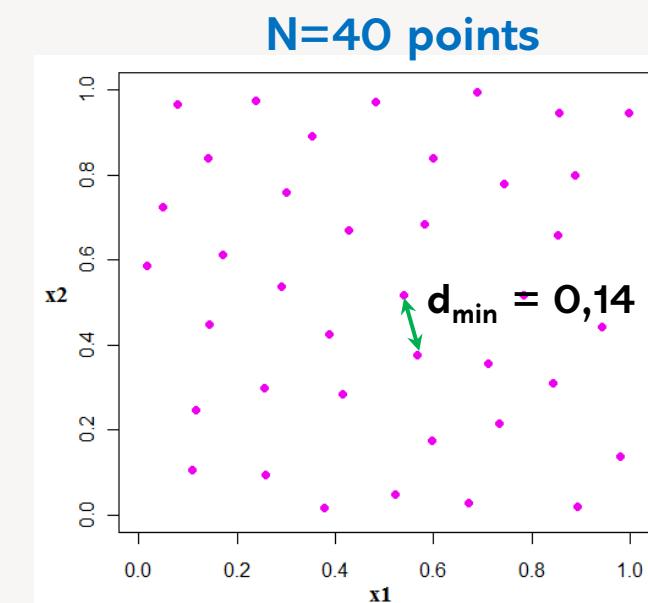
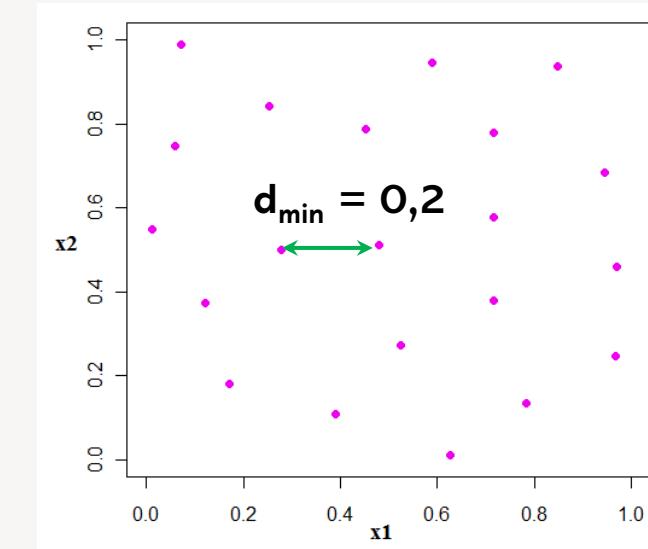
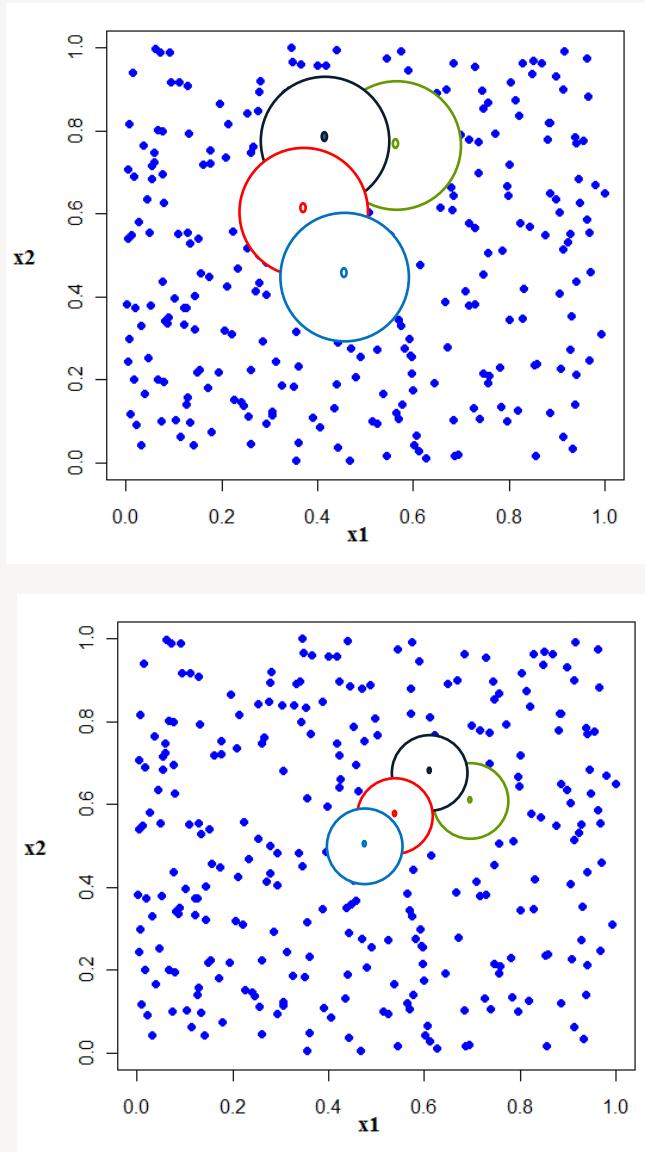
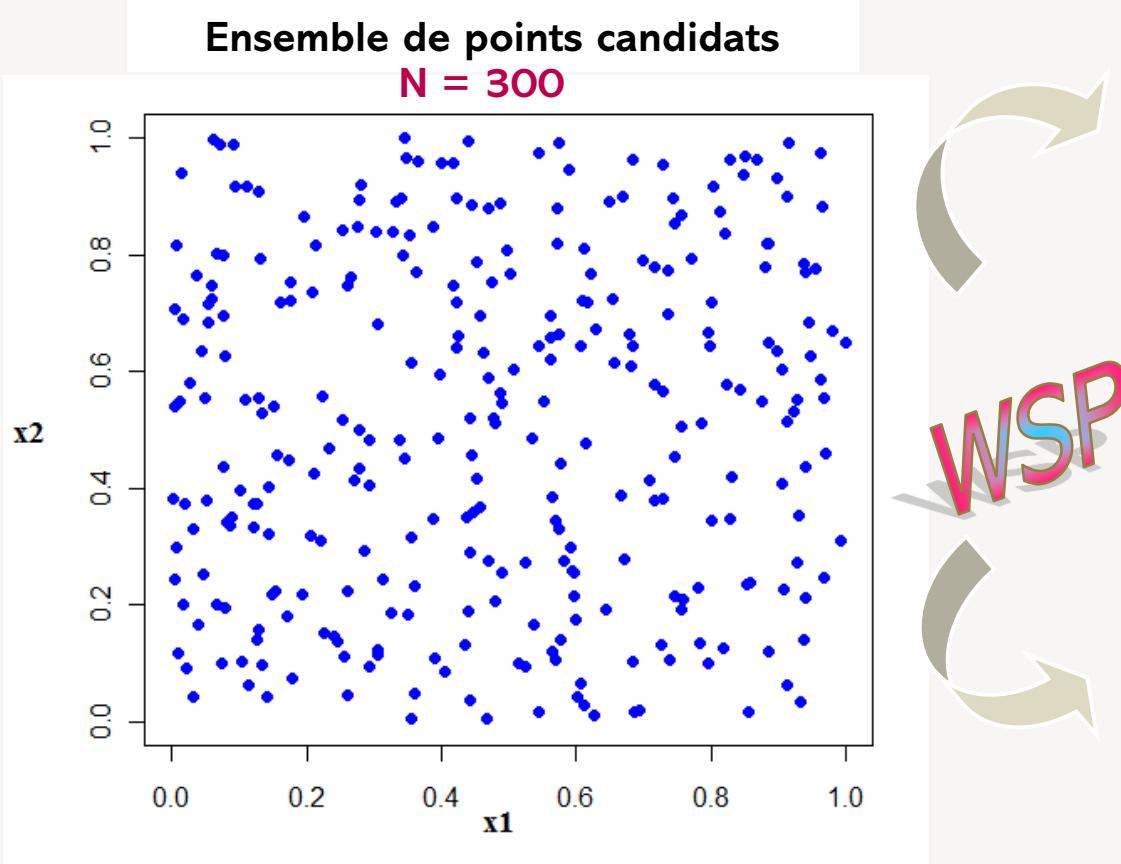


$$Mindist = \min_{x_i \in X} \min_{x_j \in X} dist(x_i, x_j) \quad \forall j \neq i$$

$$Cov = \frac{1}{\gamma n} \left(\sum_{i=1}^n (\gamma_i - \bar{\gamma})^2 \right)^{1/2}$$



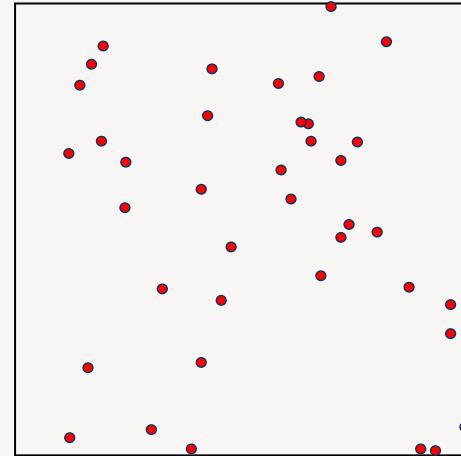
2.1 Algorithme WSP



2.1 Algorithme WSP

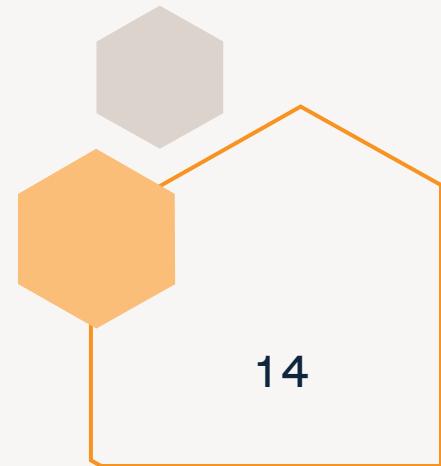
**ENSEMBLE DE
POINTS CANDIDATS**

?



- Pas d'influence de la nature de l'ensemble des points candidats,
si le nombre de points de la matrice initiale est **suffisant**

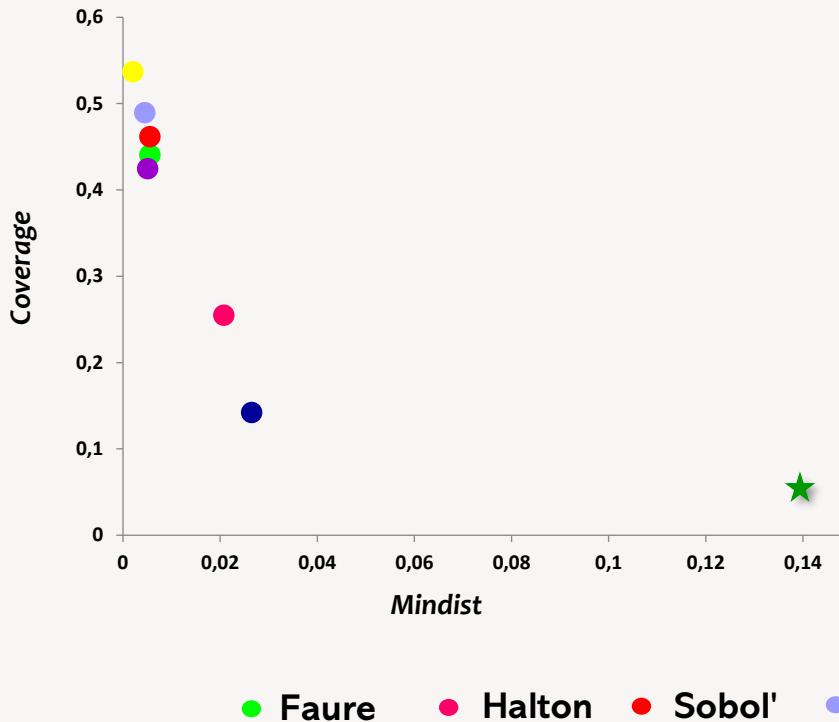
- L'influence du nombre de points de la matrice initiale se stabilise
à partir d'une certaine limite
→ Ces plans peuvent donc être envisagés en grande dimension



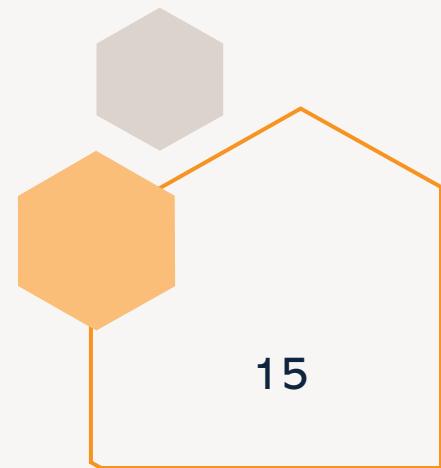
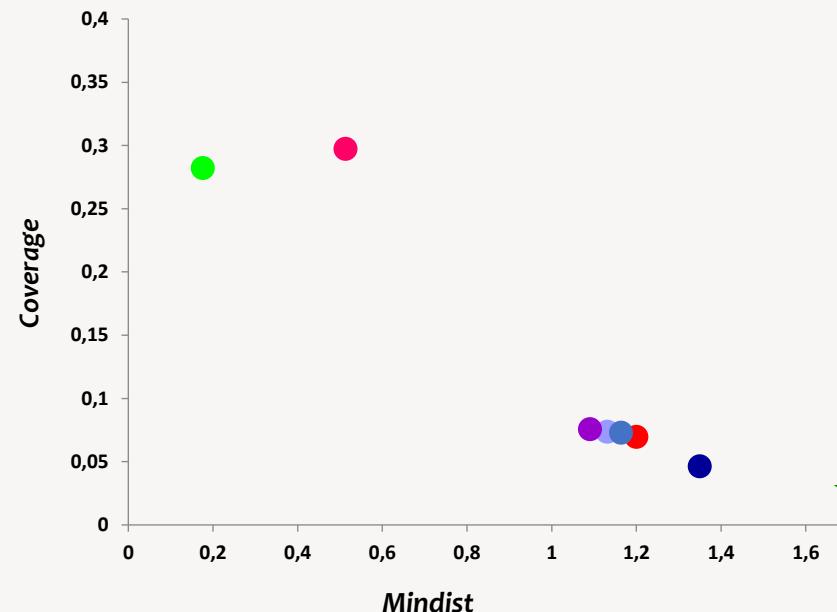
2.1 Algorithme WSP

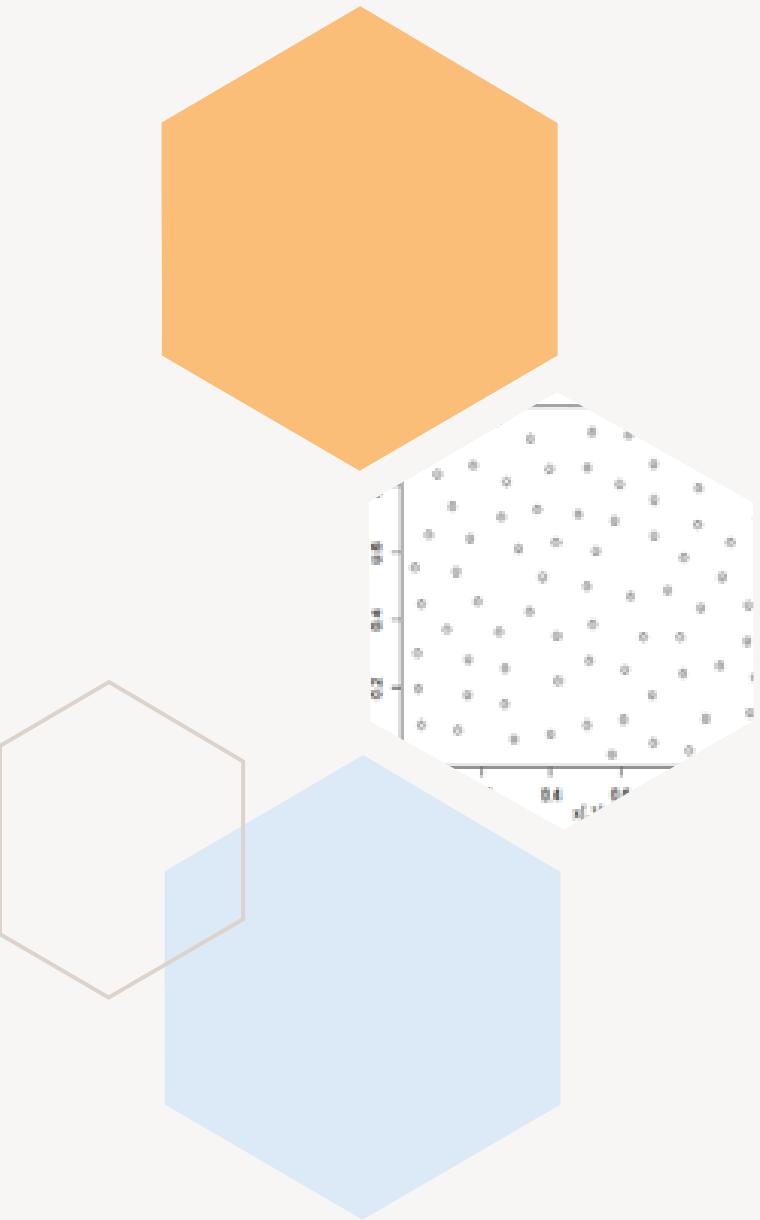
Comparaison des SFD :

2D
N = 40 points



30D
N = 600 points





1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.2 Algorithme WSP adaptatif

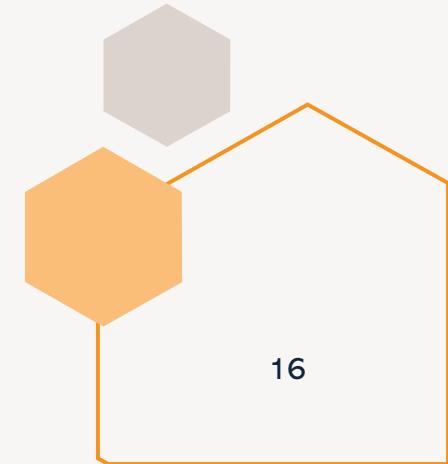
2.3 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

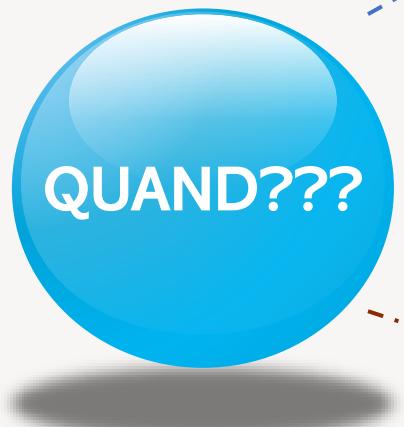
3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning



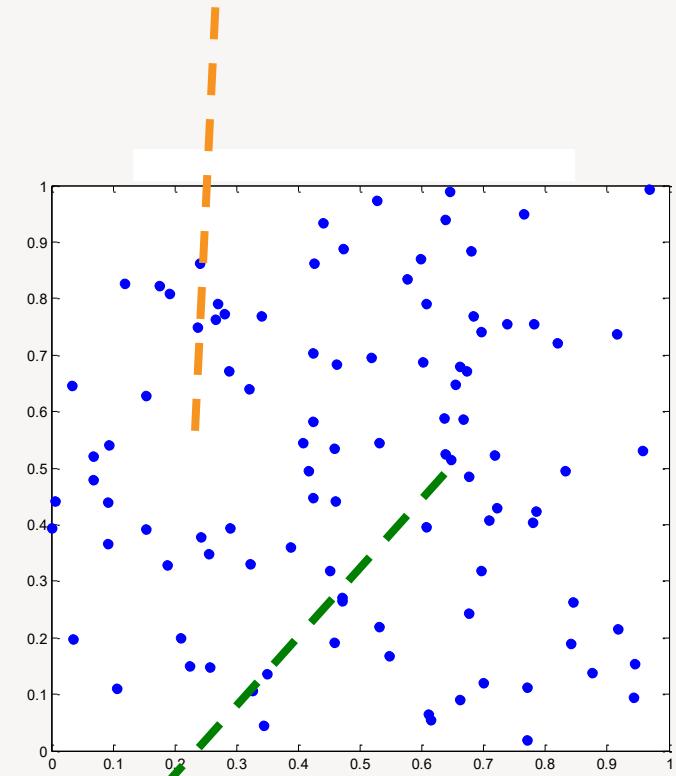
2.2 Algorithme WSP protégé



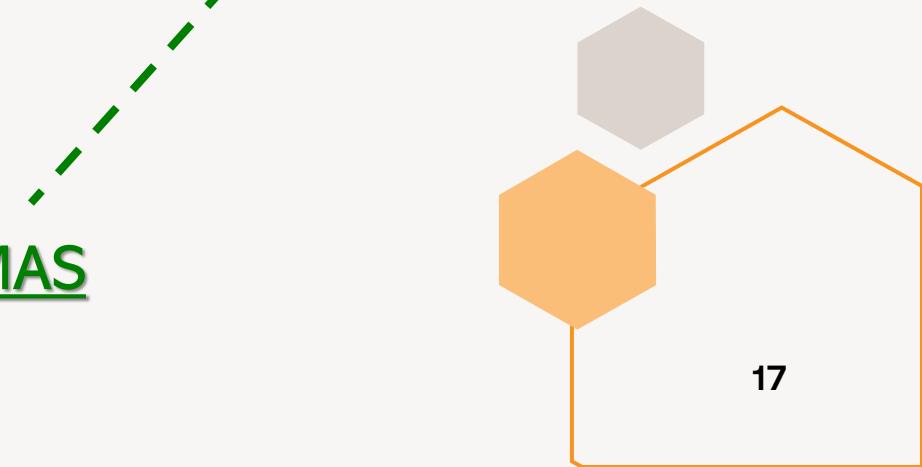
Simulations
déjà réalisées

Repliage
projection en
sous dimension

LACUNES



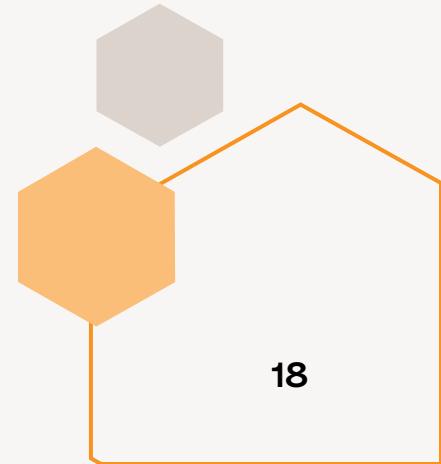
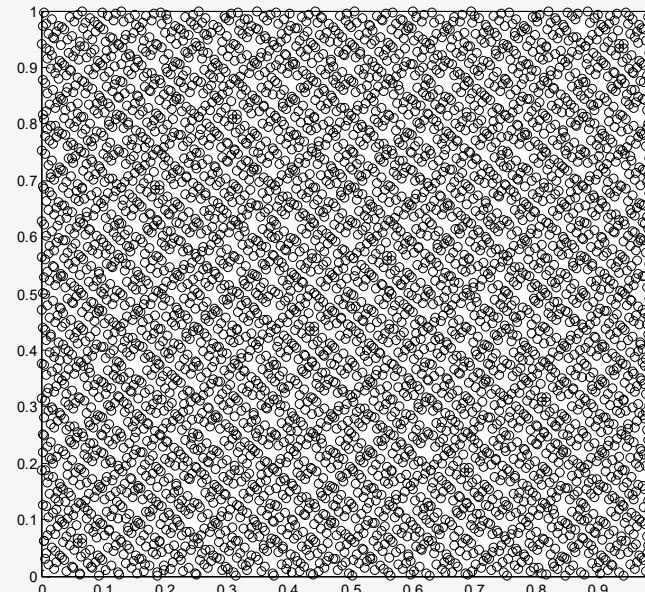
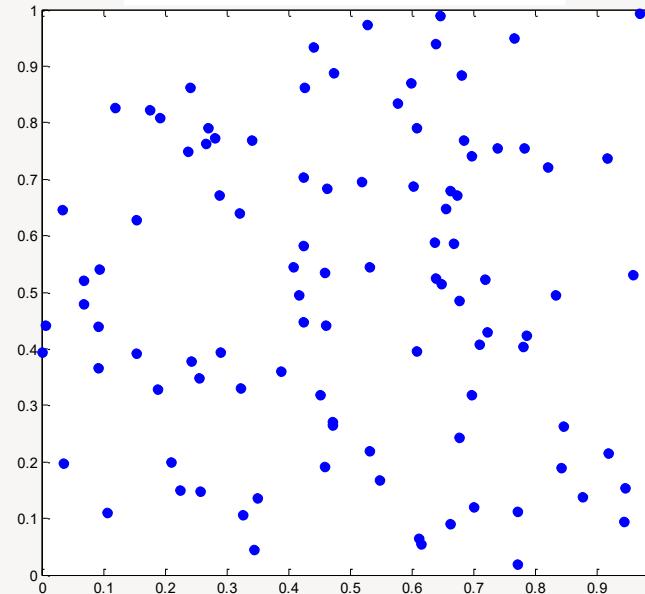
AMAS



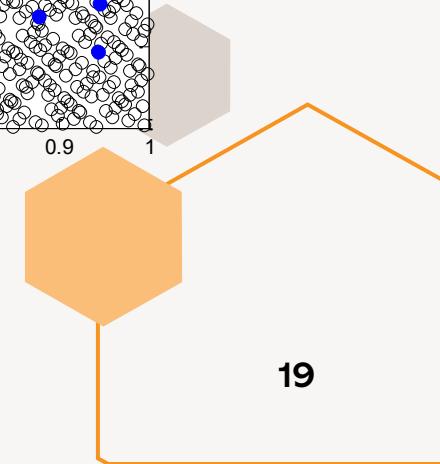
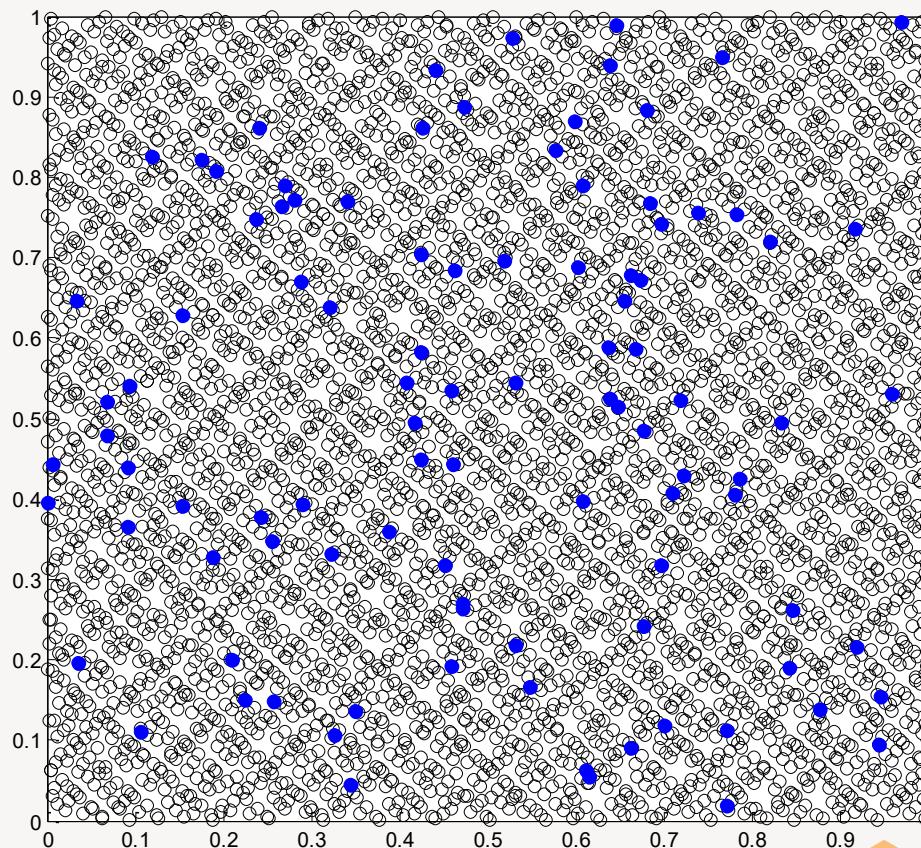
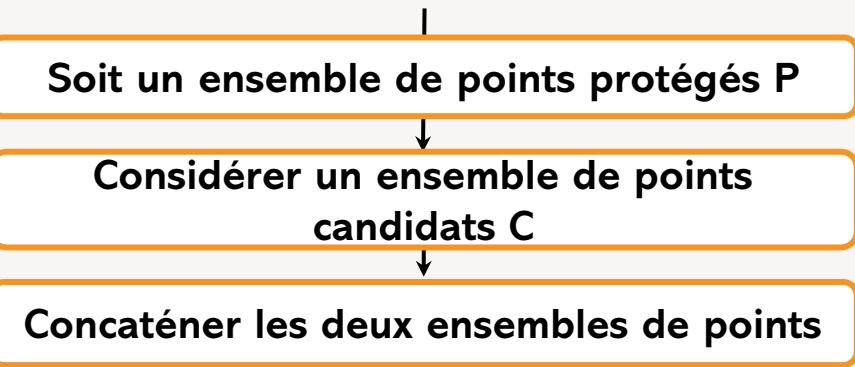
2.2 Algorithme WSP protégé

Soit un ensemble de points protégés P

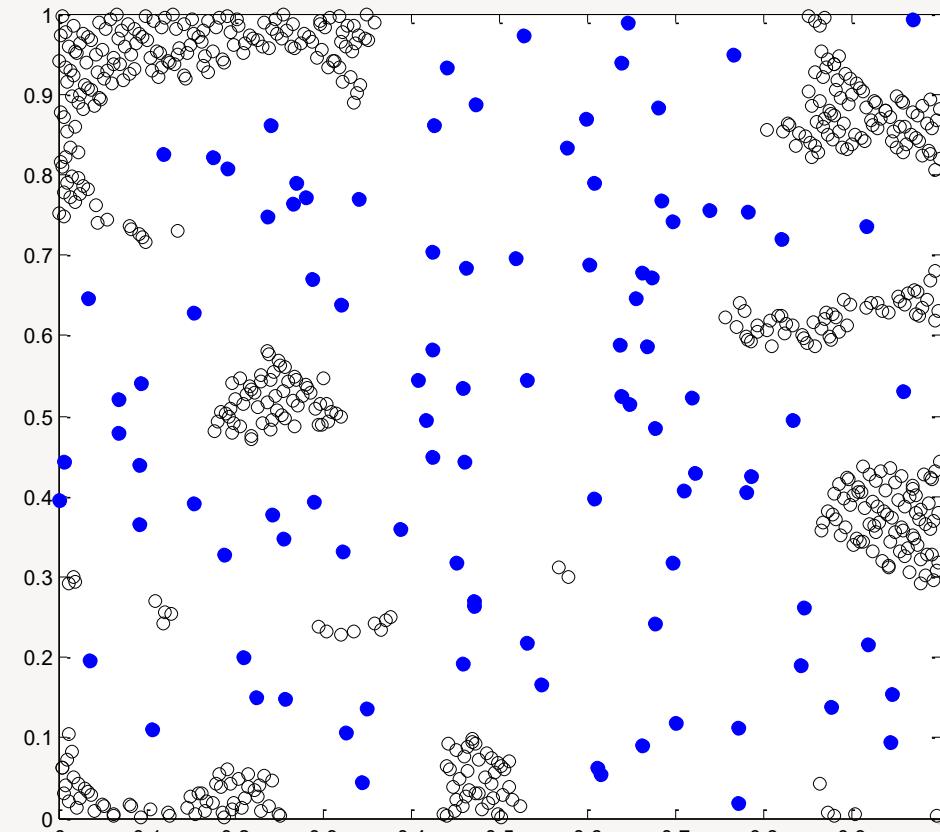
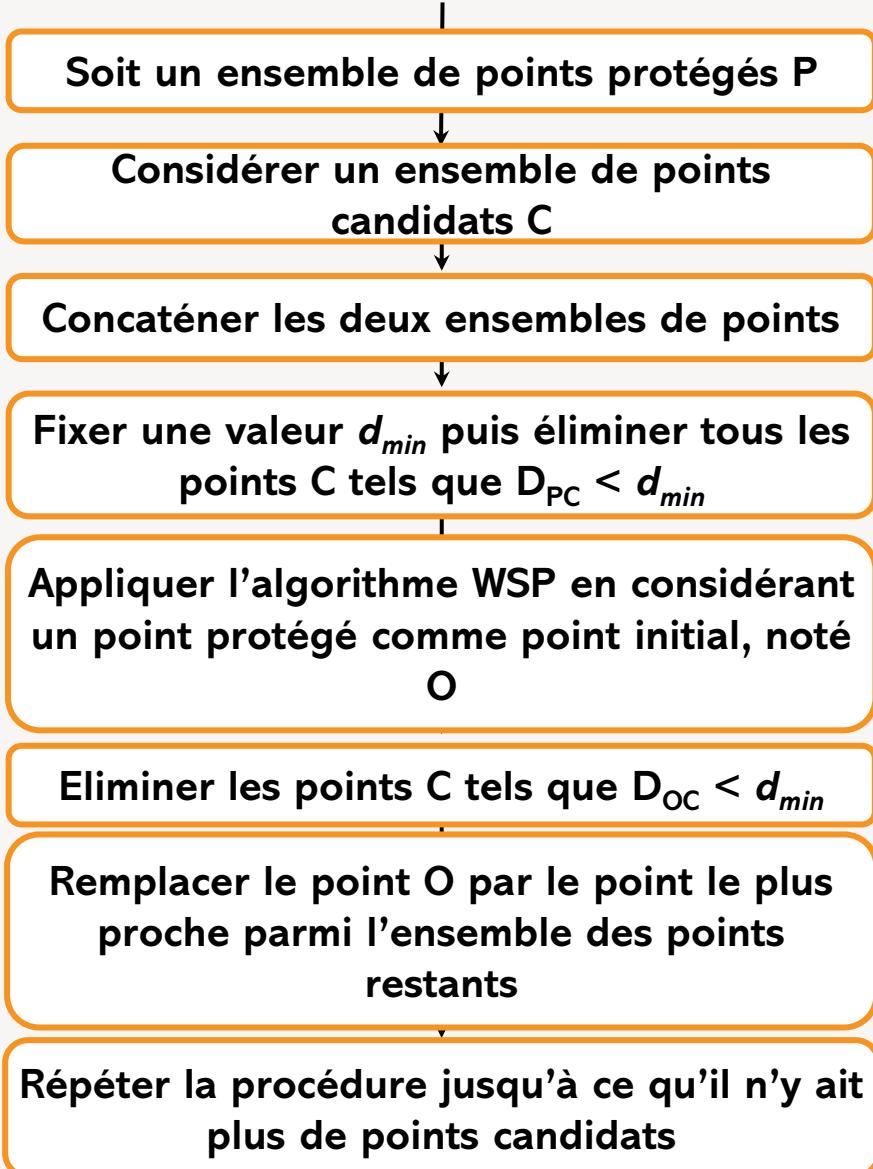
↓
Considérer un ensemble de points candidats C



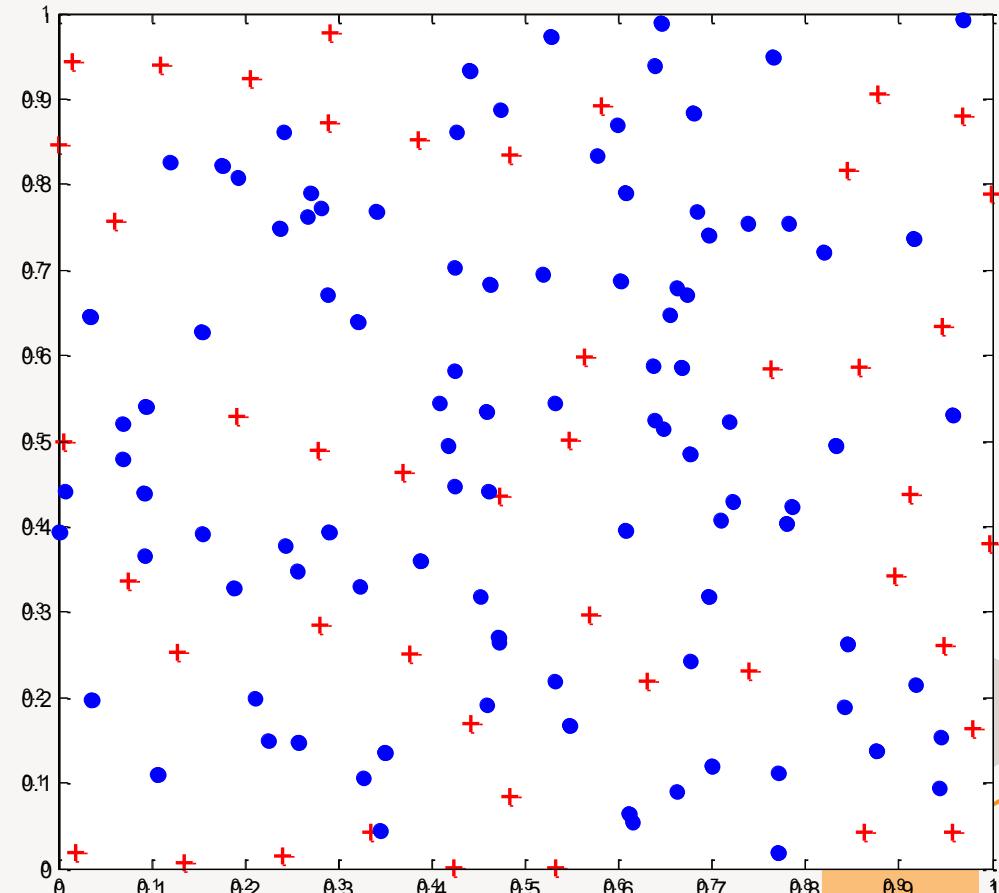
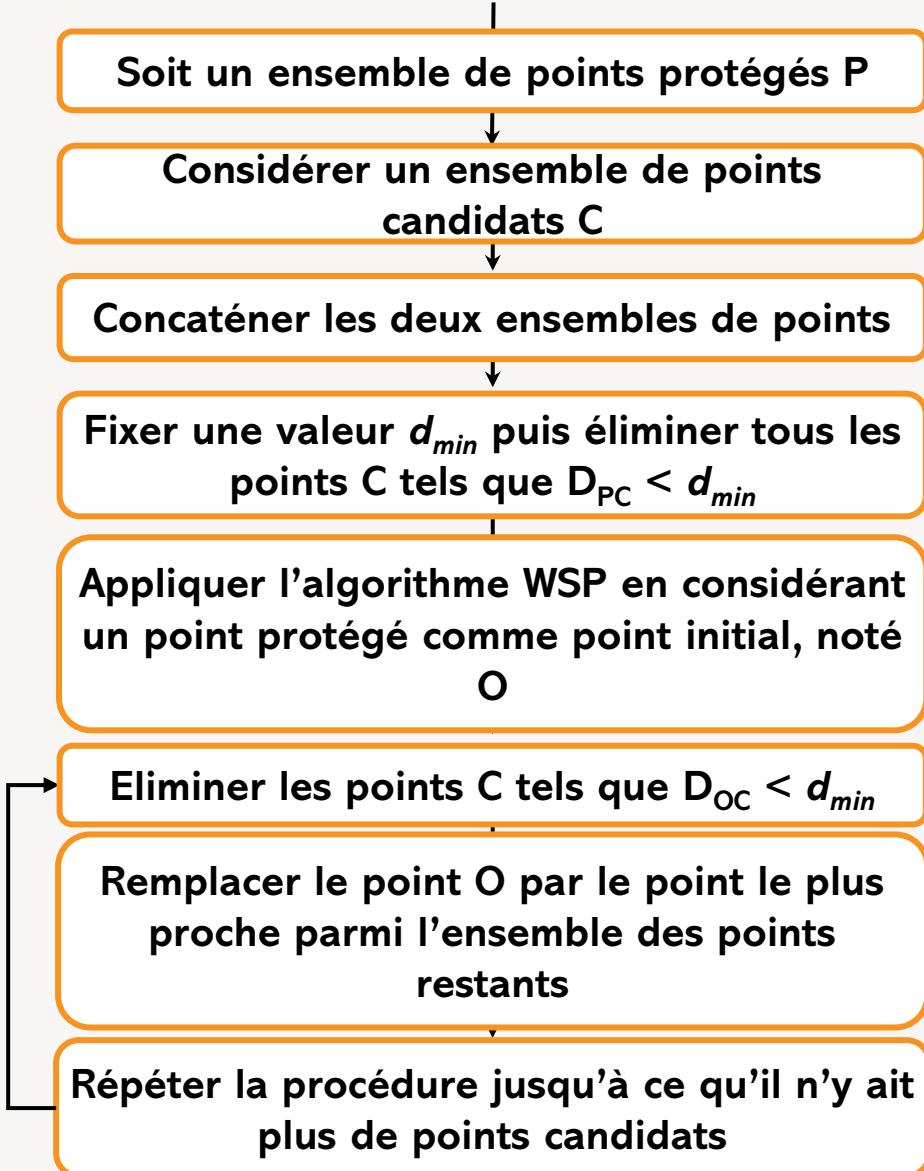
2.2 Algorithme WSP protégé

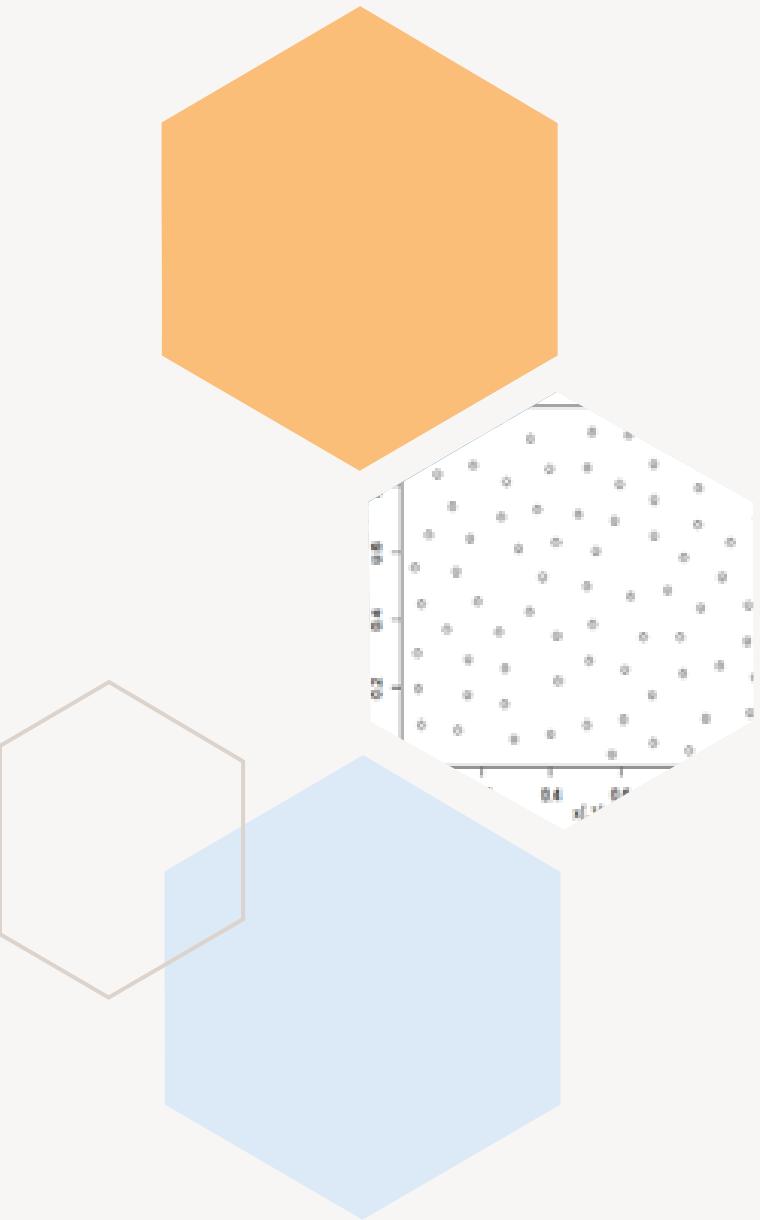


2.2 Algorithme WSP protégé



2.2 Algorithme WSP protégé





1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP adaptatif

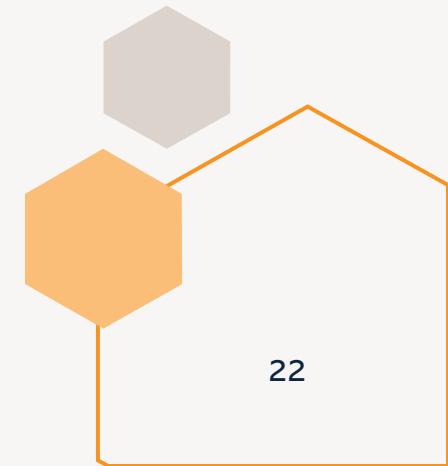
2.4 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning

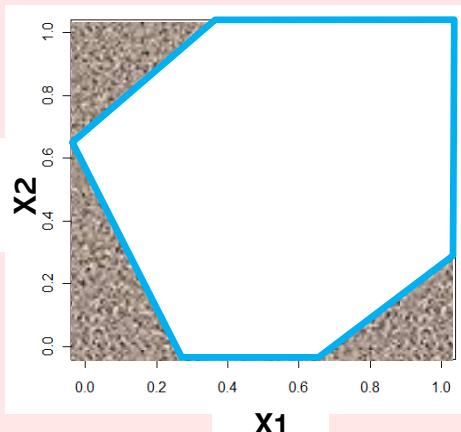


2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les X

- Relationnelles
- Probabilité de distribution

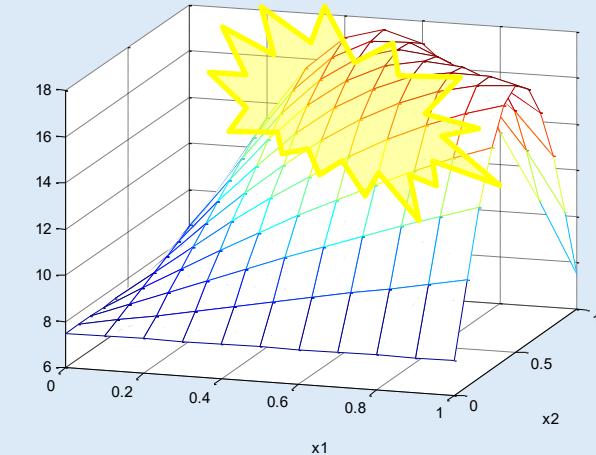
Domaine expérimental avec contraintes



Contraintes sur les Y :

- Valeurs cibles
- Zones chaotiques

Zone à densifier



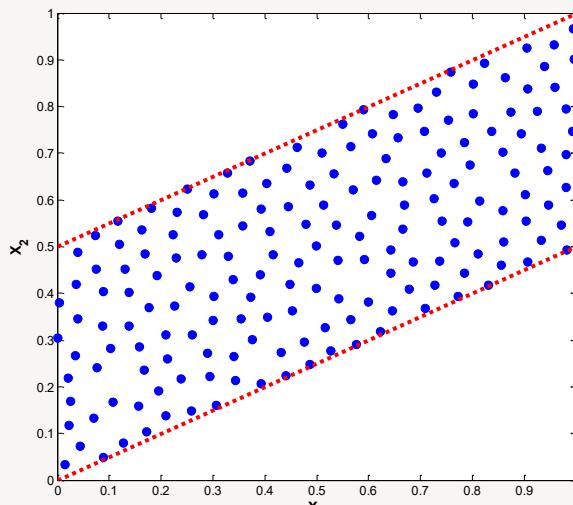
2.3 Algorithme WSP adaptatif

Constraintes sur les X
- Relationnelles

La zone d'intérêt à densifier est définie par : $0.5 X_1 < X_2 < 0.5 X_1 + 0.5$

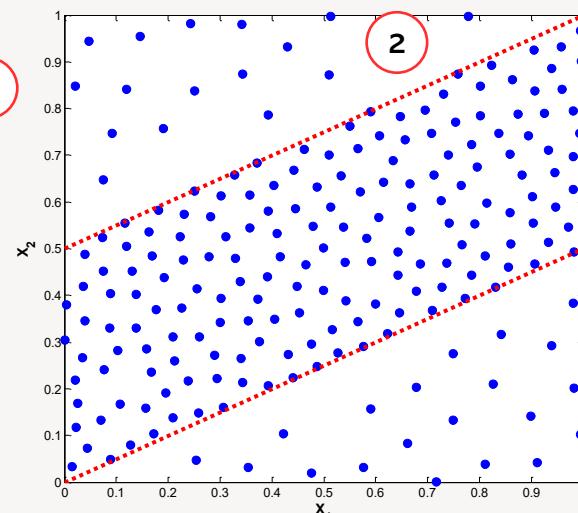
3 possibilités

On souhaite étudier seulement la zone d'intérêt



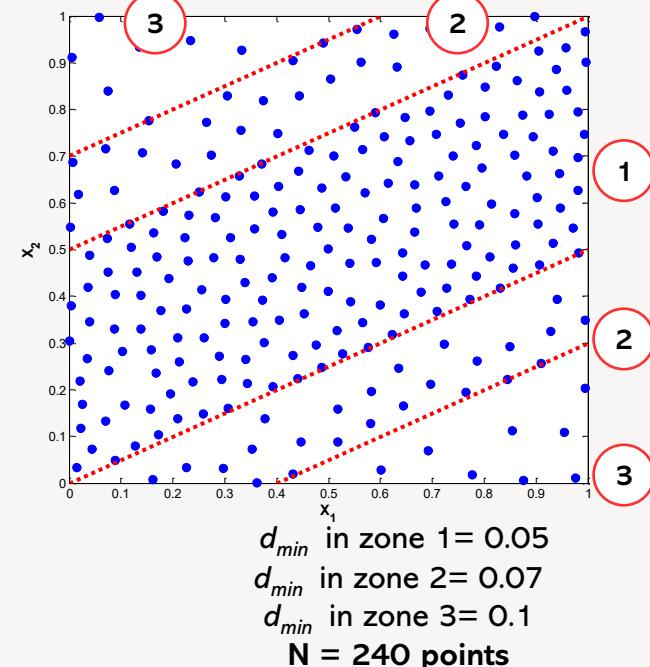
d_{min} in zone 1 = 0.05
 $N = 176$ points

On souhaite étudier l'ensemble de l'espace en augmentant la densité dans la zone d'intérêt

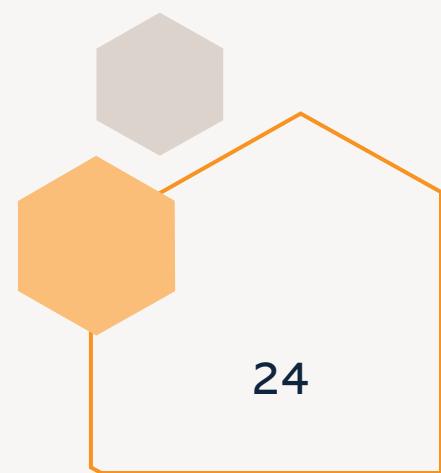


d_{min} in zone 1 = 0.05
 d_{min} in zone 2 = 0.1
 $N = 214$ points

On souhaite étudier l'ensemble de l'espace avec des densités variables



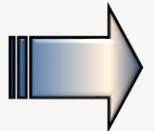
d_{min} in zone 1 = 0.05
 d_{min} in zone 2 = 0.07
 d_{min} in zone 3 = 0.1
 $N = 240$ points



2.3 Algorithme WSP adaptatif

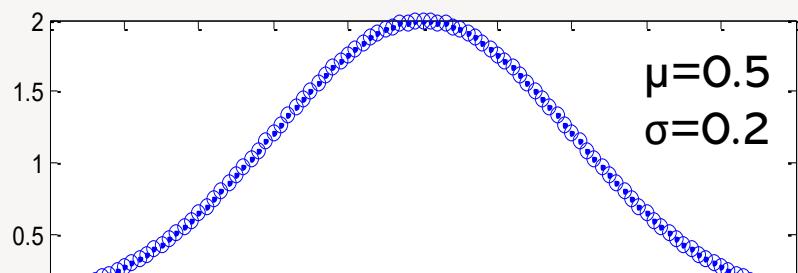
Contraintes sur les X
- Probabilité de distribution

La zone d'intérêt à densifier est définie par les fonctions de distributions des variables

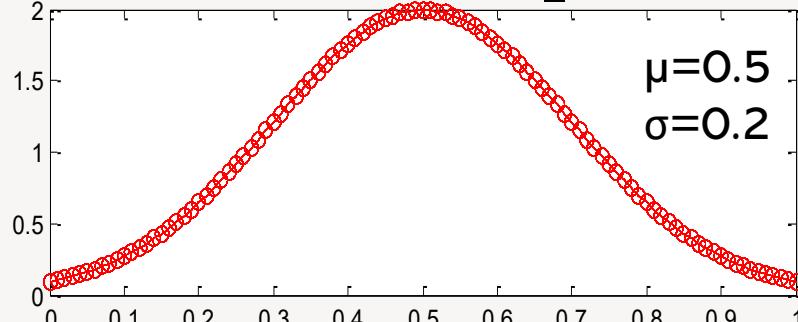


Relier la variation du dmin avec la probabilité de distribution

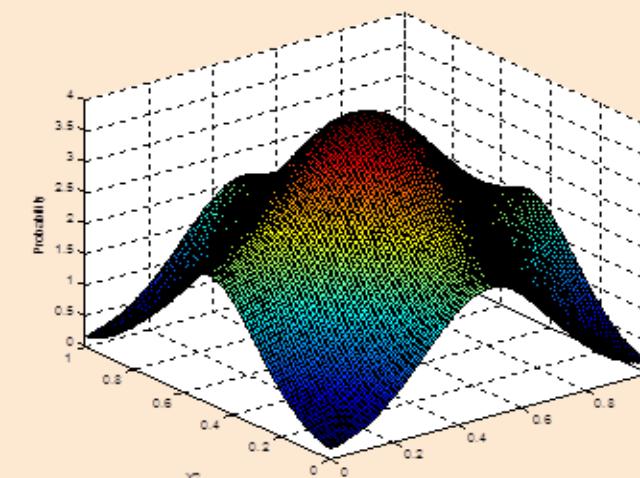
Distribution variable X_1



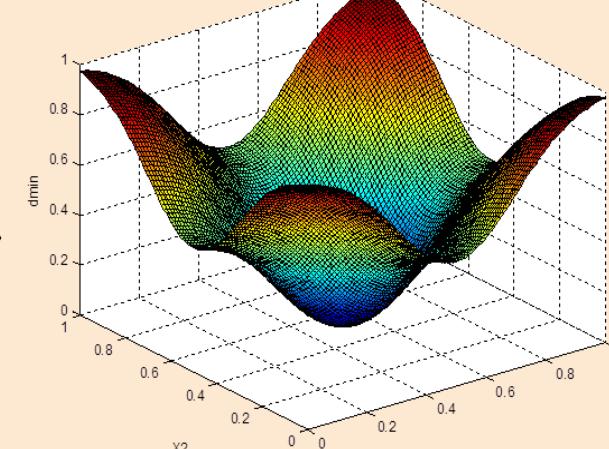
Distribution variable X_2



Fonction de probabilité globale



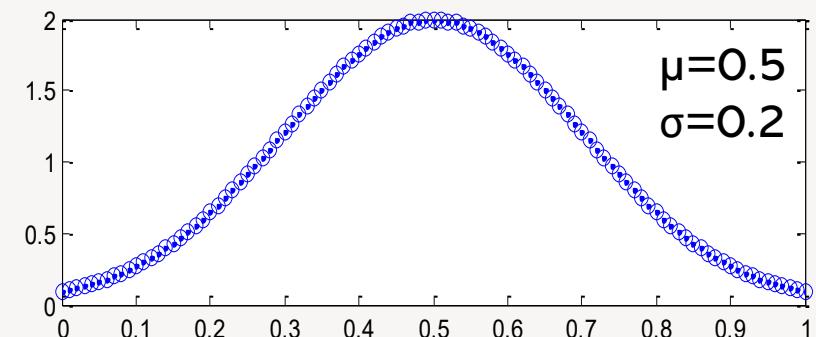
Fonction dmin



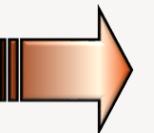
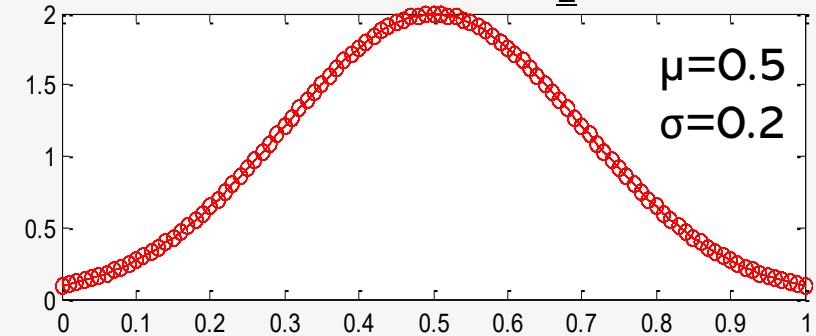
2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les X
- Probabilité de distribution

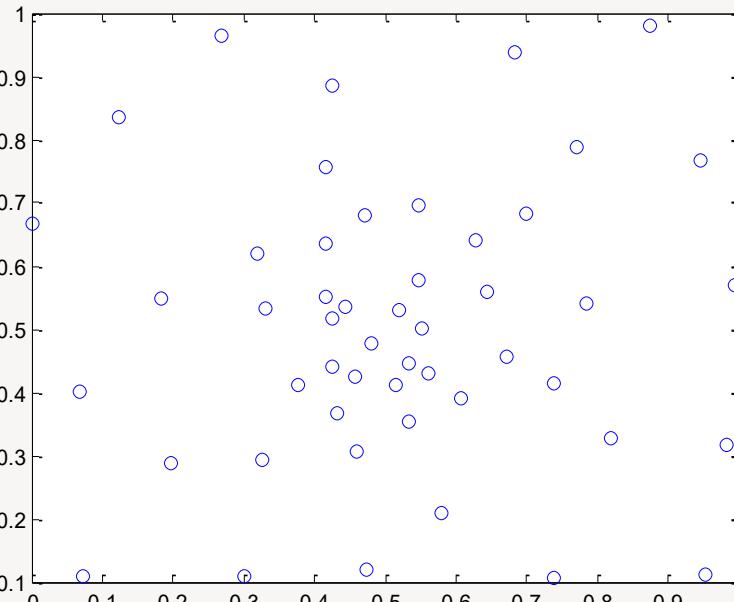
Distribution variable X_1



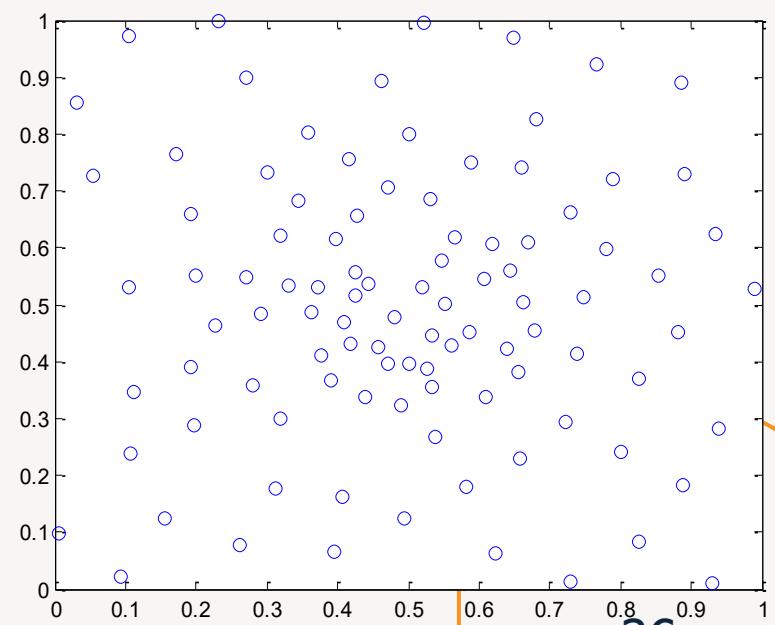
Distribution variable X_2



N=50 points



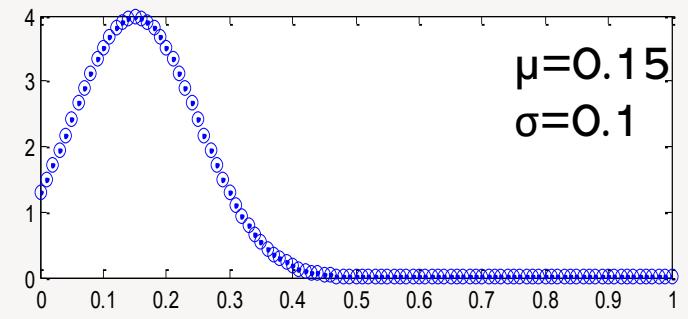
N=100 points



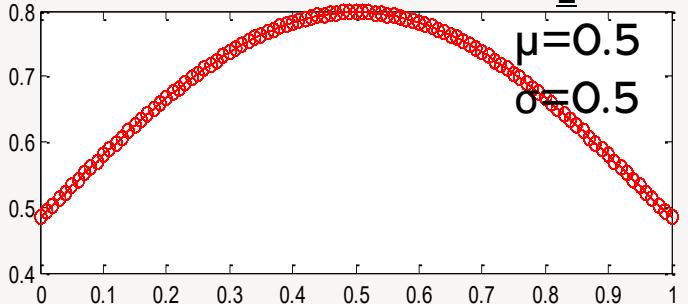
2.3 Algorithme WSP adaptatif

- **Contraintes sur les X**
- Probabilité de distribution

Distribution variable X_1

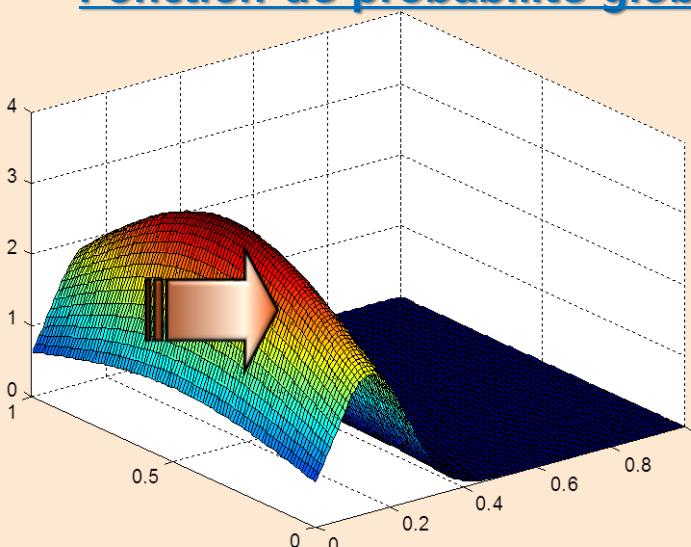


Distribution variable X_2

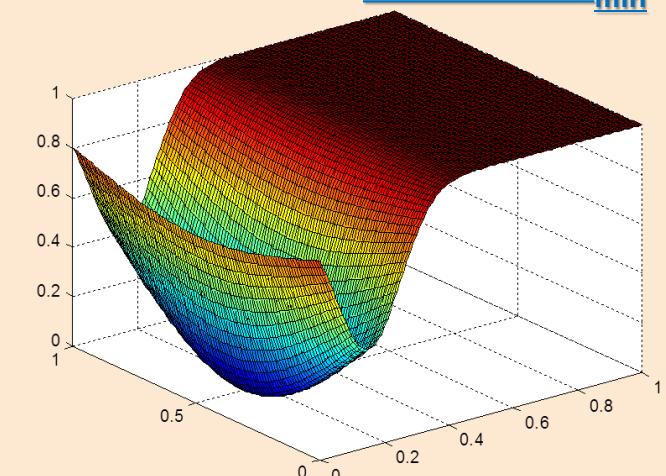


N= 50 points

Fonction de probabilité globale



Fonction d_{\min}

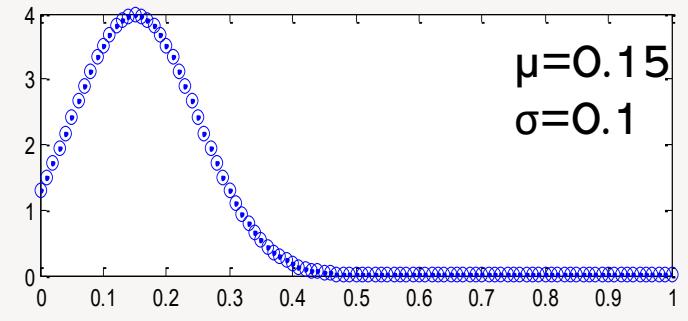


2.3 Algorithme WSP adaptatif

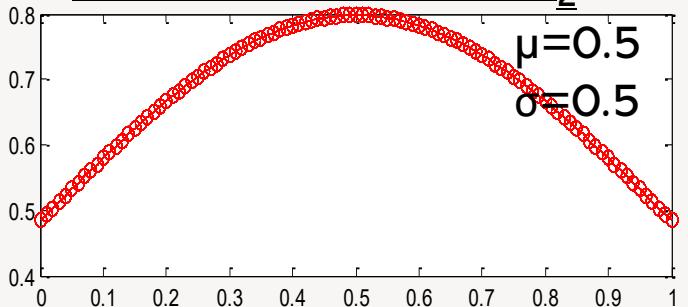
Contraintes sur les X

- Probabilité de distribution

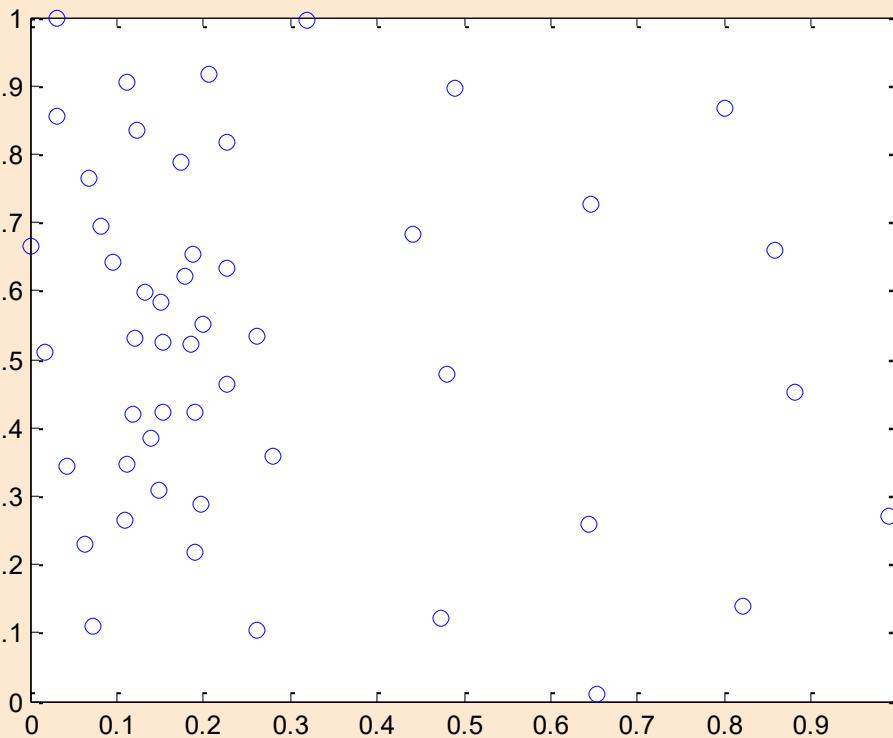
Distribution variable X_1



Distribution variable X_2



N= 50 points

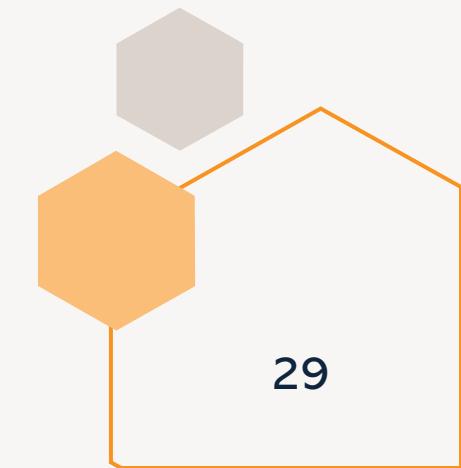
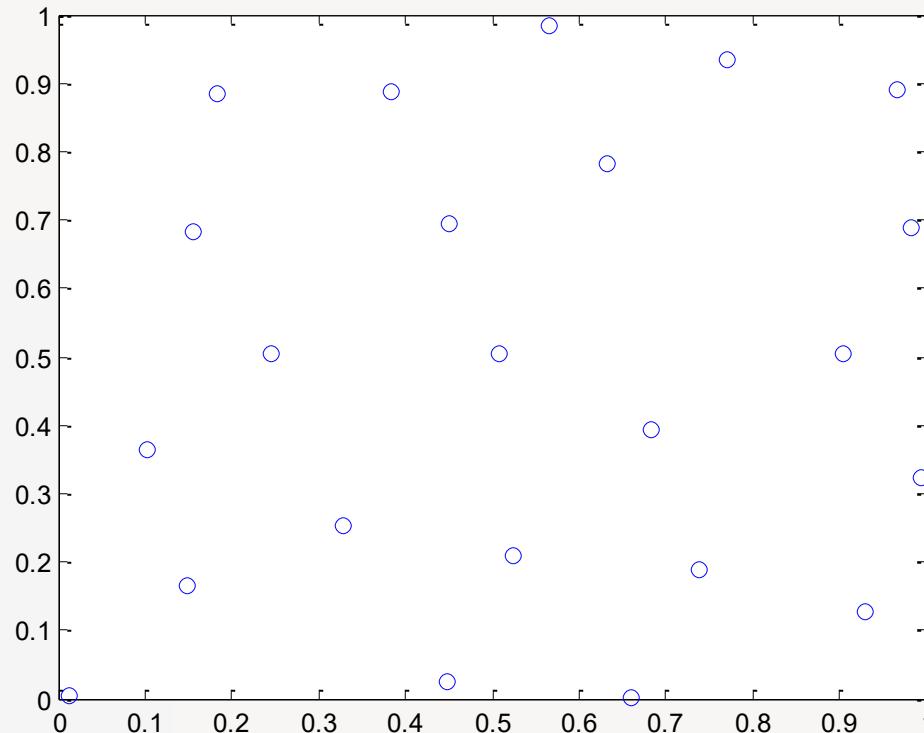


2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les Y :
- Valeurs cibles

→ Enrichir la/les zone(s) favorable(s)

Répartition uniforme



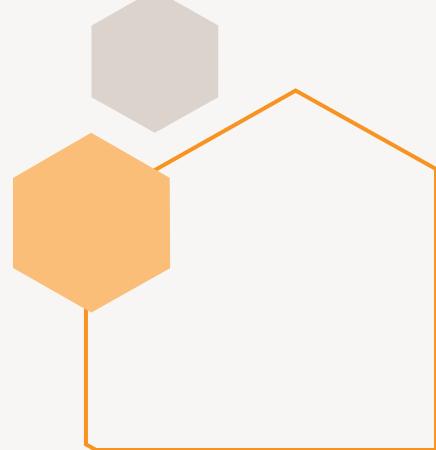
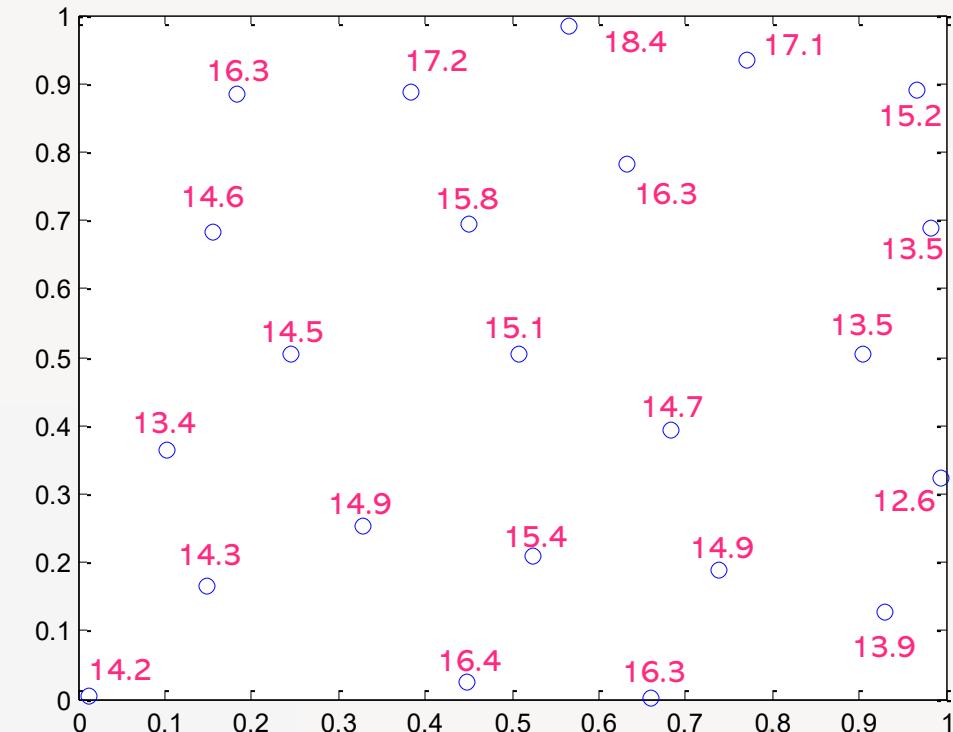
2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les Y :
- Valeurs cibles

Répartition uniforme

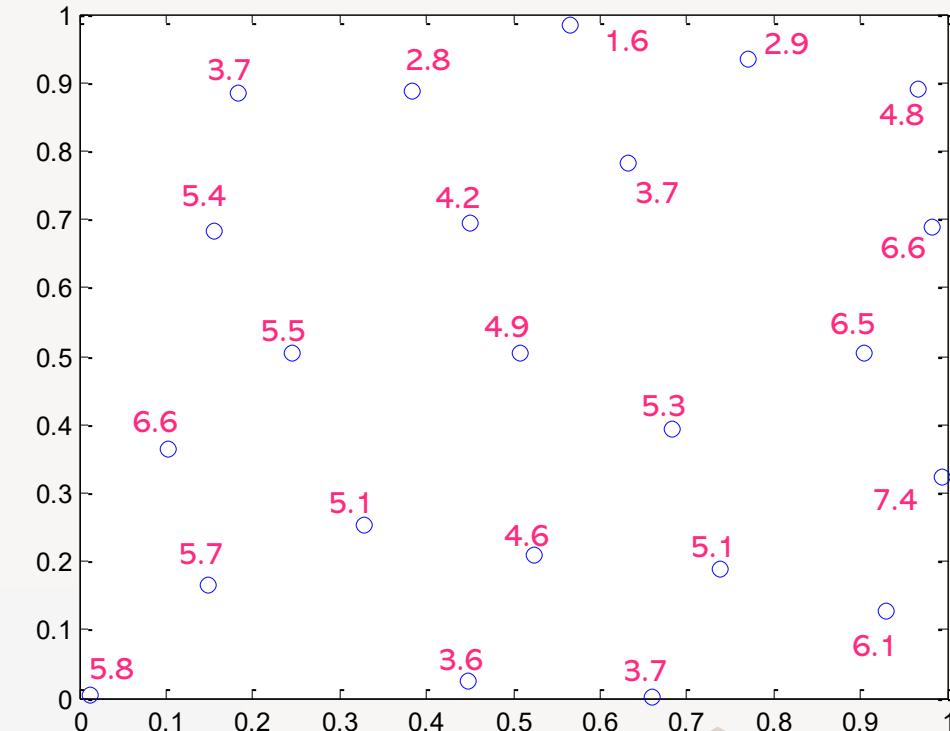


Réalisation expériences



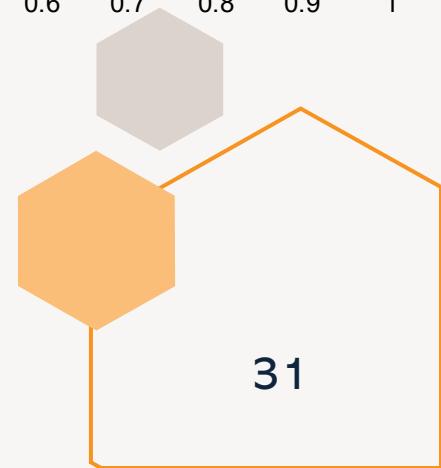
2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les Y :
- Valeurs cibles



Calcul des dmin pour
chaque point

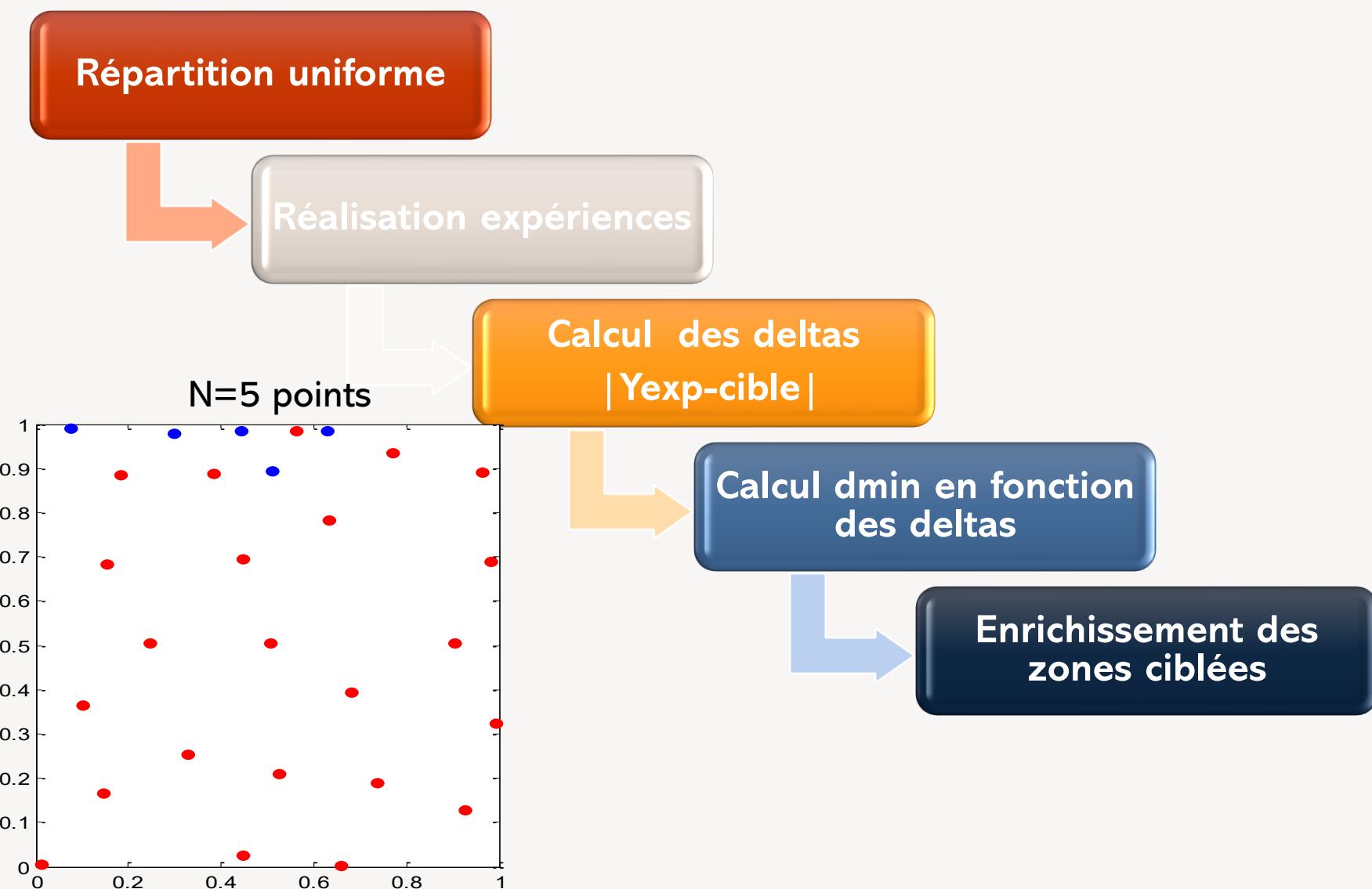
$$dmin(i,1) = \text{ecart}(i) * \text{Coef}$$



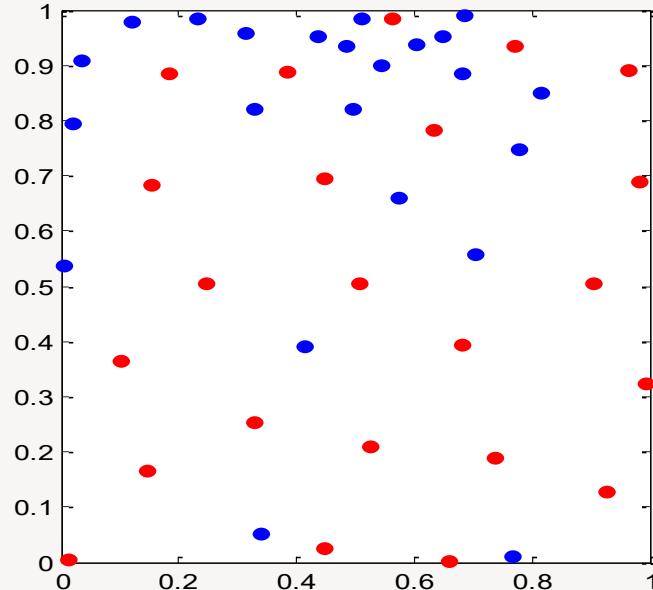
2.3 Algorithme WSP adaptatif

Contraintes sur les Y :
- Valeurs cibles

Contraintes sur les sorties : valeurs cibles



N=23 points

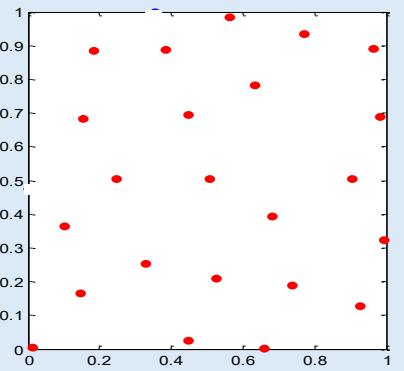
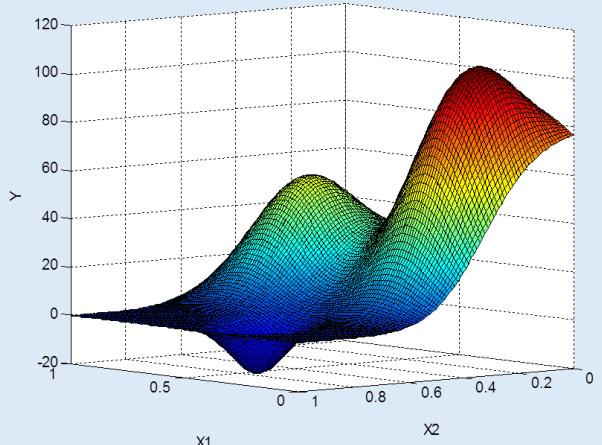


2.3 Algorithme WSP adaptatif

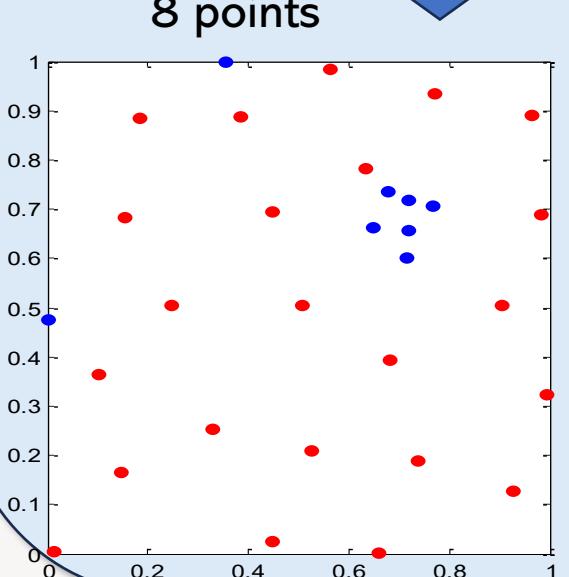
Contraintes sur les Y :
- Valeurs cibles

Objectif : Maximisation de la réponse

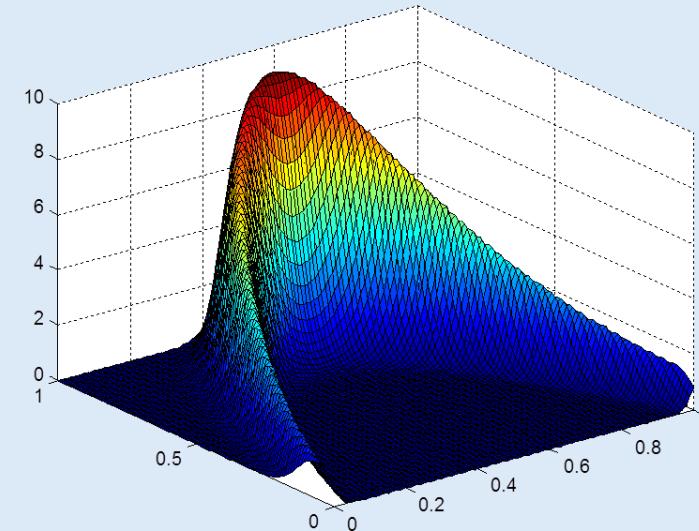
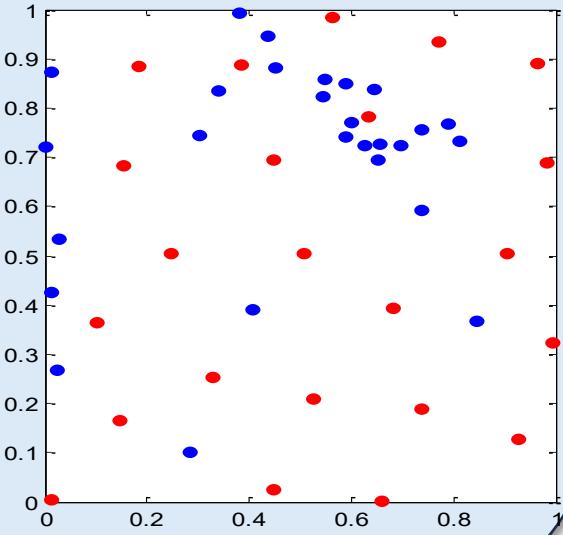
$Y > 50$



8 points



27 points

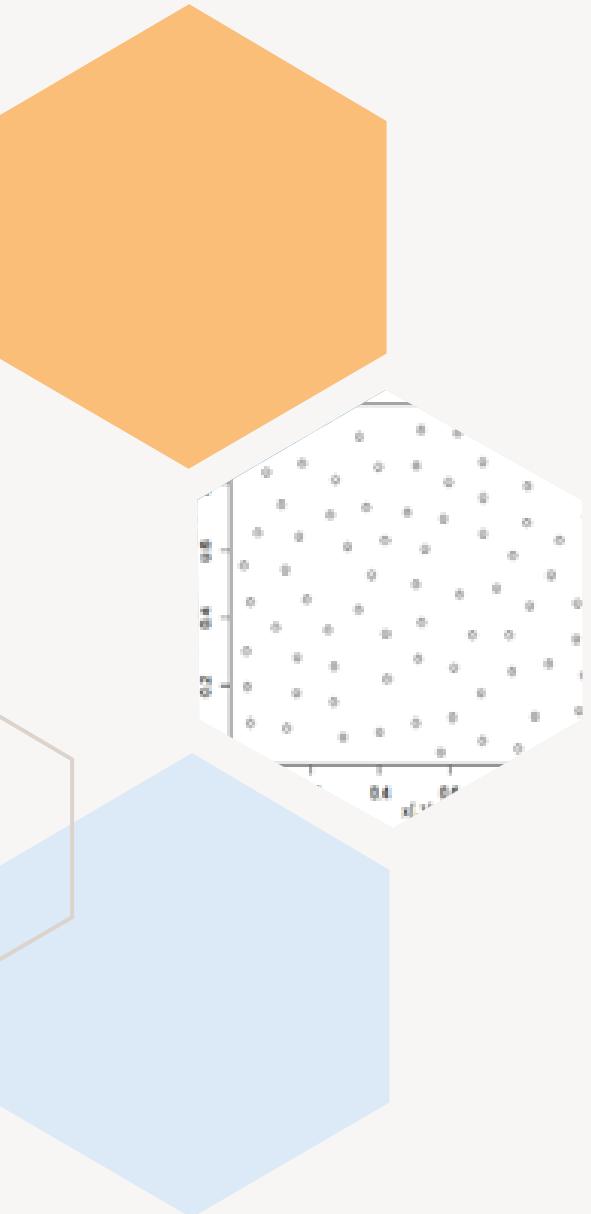


Surface de réponses
chaotique

Très difficile à appréhender



$D_{min} = f(\text{Gradient})$



1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP adaptatif

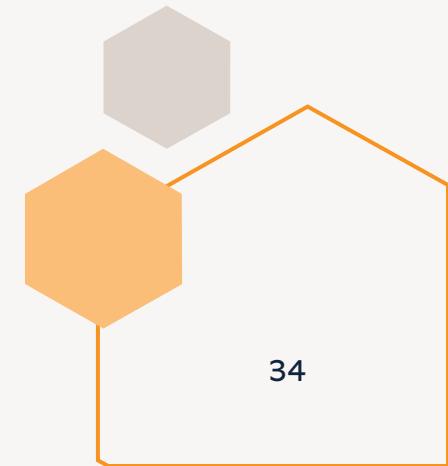
2.4 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning

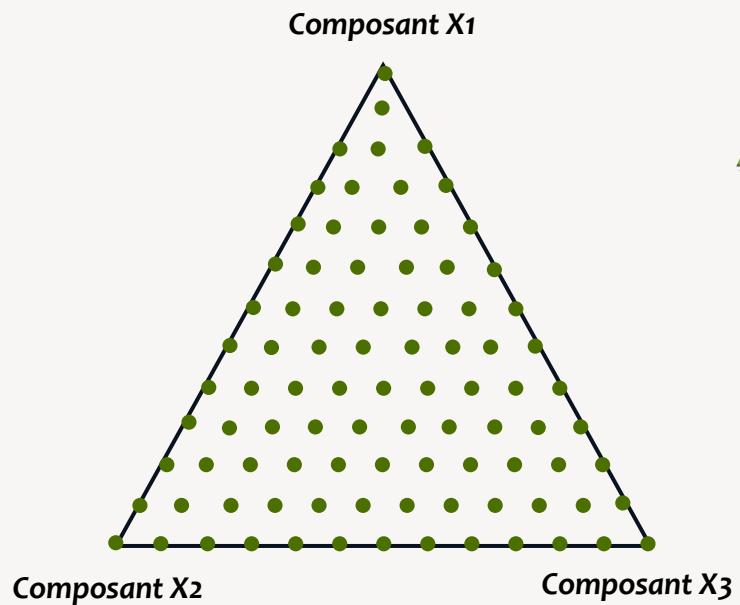


2.5 Algorithme WSP pour les plans de mélanges

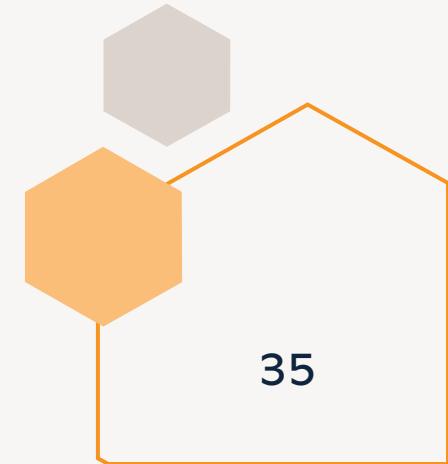
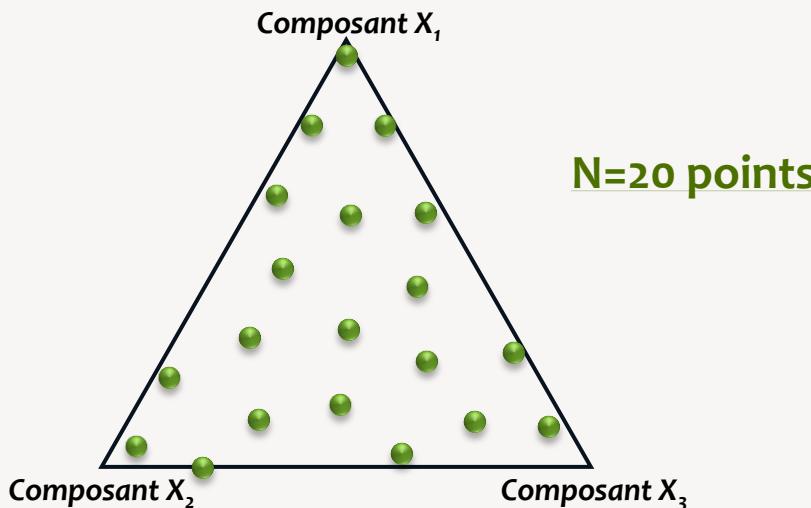
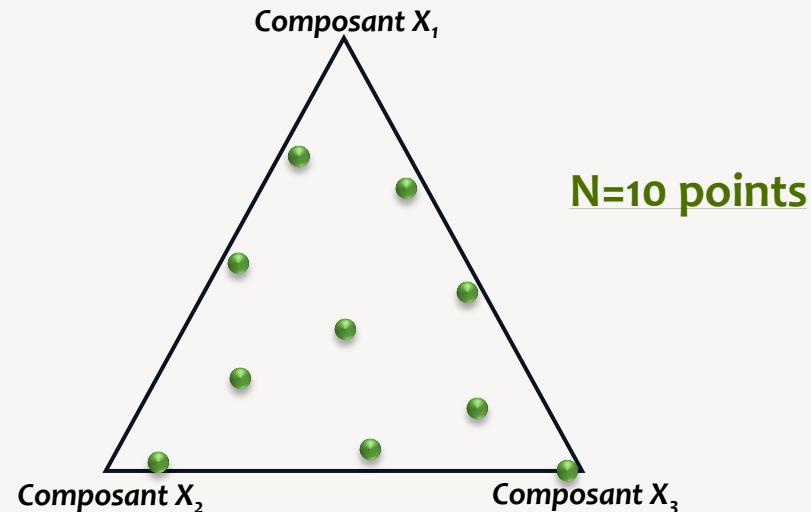
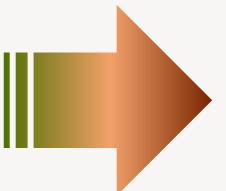
Générer les points candidats dans domaine du simplexe :

$$0 \leq x_i \leq 1$$

$$\sum_i x_i = 1$$



Algorithme WSP



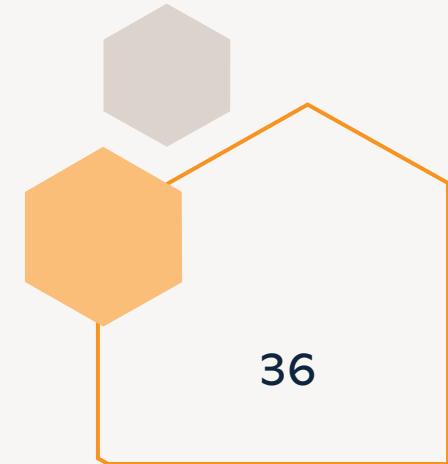
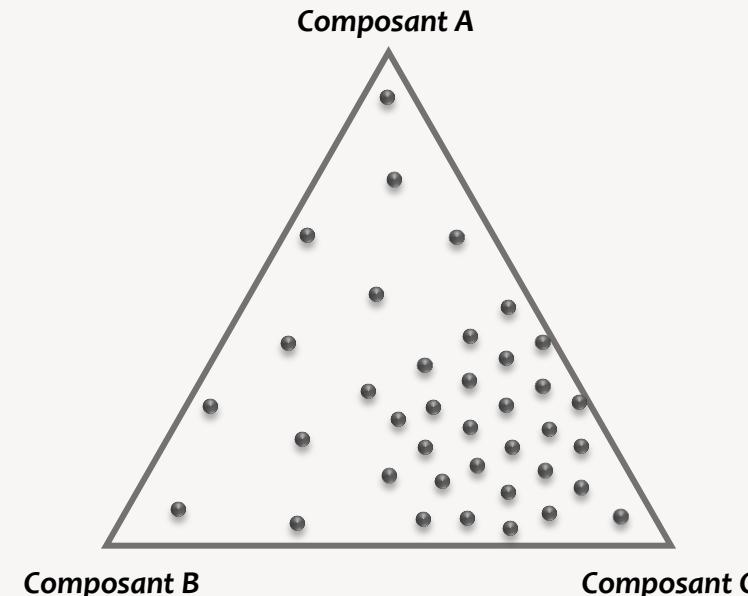
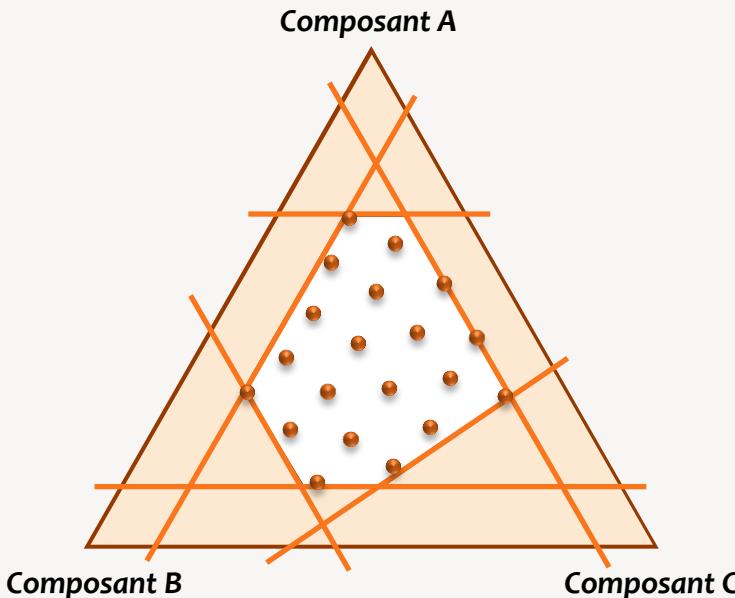
2.5 Algorithme WSP pour les plans de mélanges



- Contraintes individuelles ou relationnelles

- Densité de points variables dans les zones d'intérêt

Algorithme WSP adaptatif





1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP adaptatif

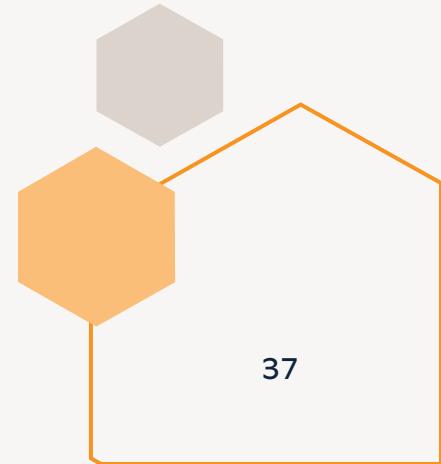
2.4 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.2 Deep learning



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive



Sélection d'huiles extra vierge dans le cadre de concours organisés par AVPA avec trois descripteurs

Trois étapes de sélection pour l'évaluation des propriétés organoleptiques de l'huile d'olive (élimination des huiles présentant des défauts lors de la première étape)

Maturité aromatique - score (0 -10)

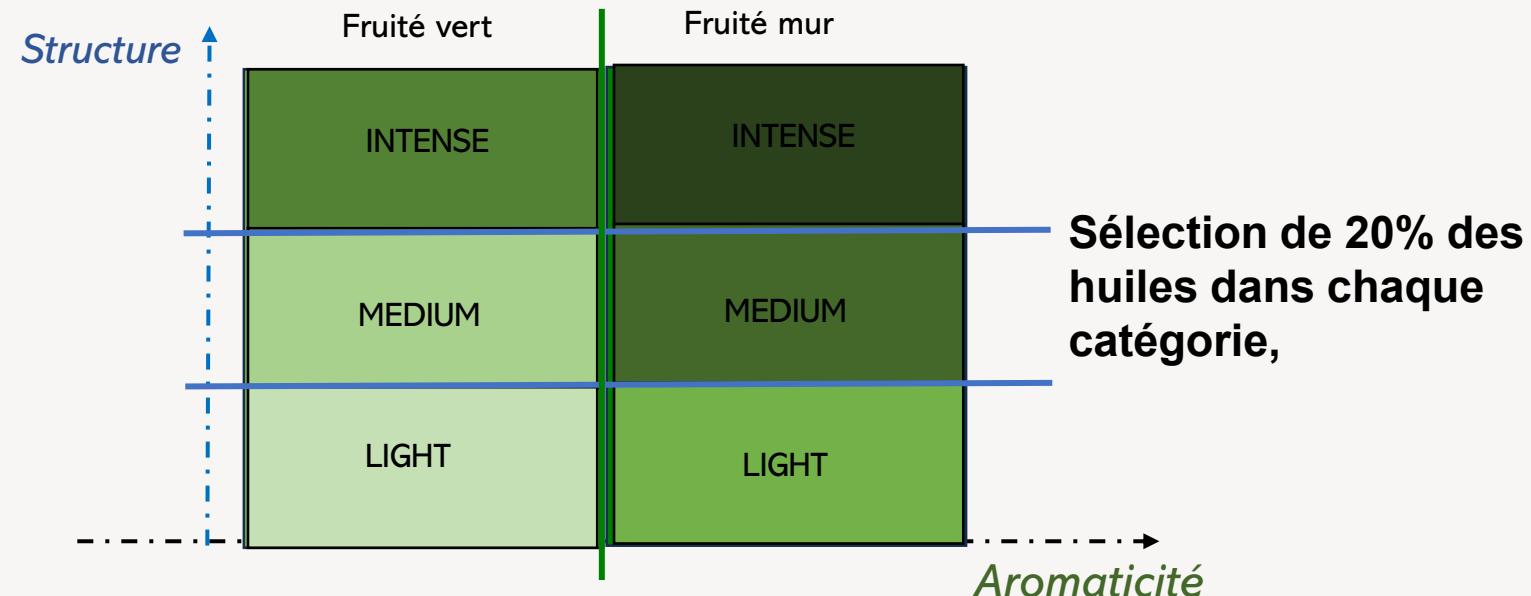
Un descripteur spécifique représentant le degré de maturité fruitée : vert (0) ou mûr (10)

Structure - score (0 -10)

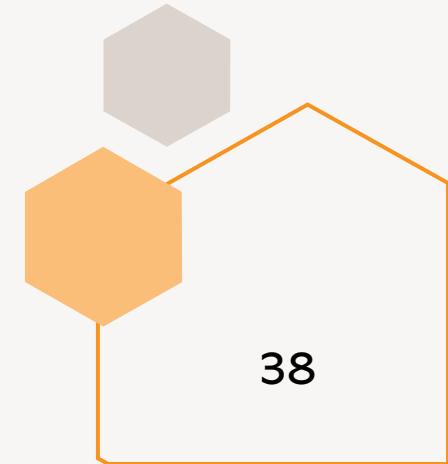
Une combinaison des scores d'amertume et de piquant afin de prendre en compte les préférences des consommateurs

Fruité - score (0-20)

Fondé sur l'intensité et l'équilibre sensoriel de l'huile d'olive



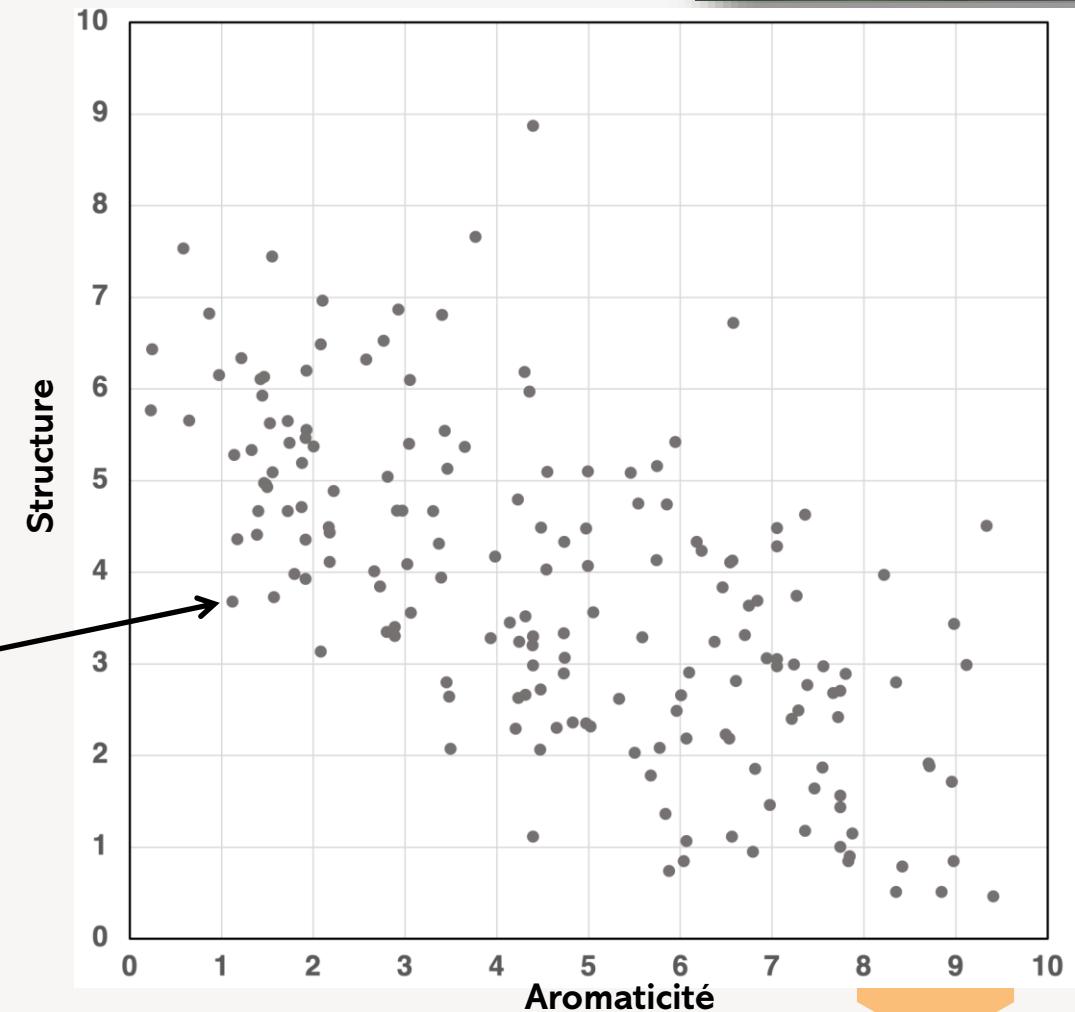
À l'étape finale, les huiles d'olive sont sélectionnées en fonction de leur score de fruité



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive



Huiles d'olive	Structure (/10)	Aromaticité (/10)	Fruité (/20)
1	5,65	1,72	16,3
2	2,23	6,50	13,5
3	0,787	8,42	11,4
4	2,99	7,24	12,4
...
54	4,41	1,39	15,5
55	3,93	1,92	15,6
56	5,63	1,53	16,1
57	2,72	4,48	13,8
...
212	5,93	1,45	17,3



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

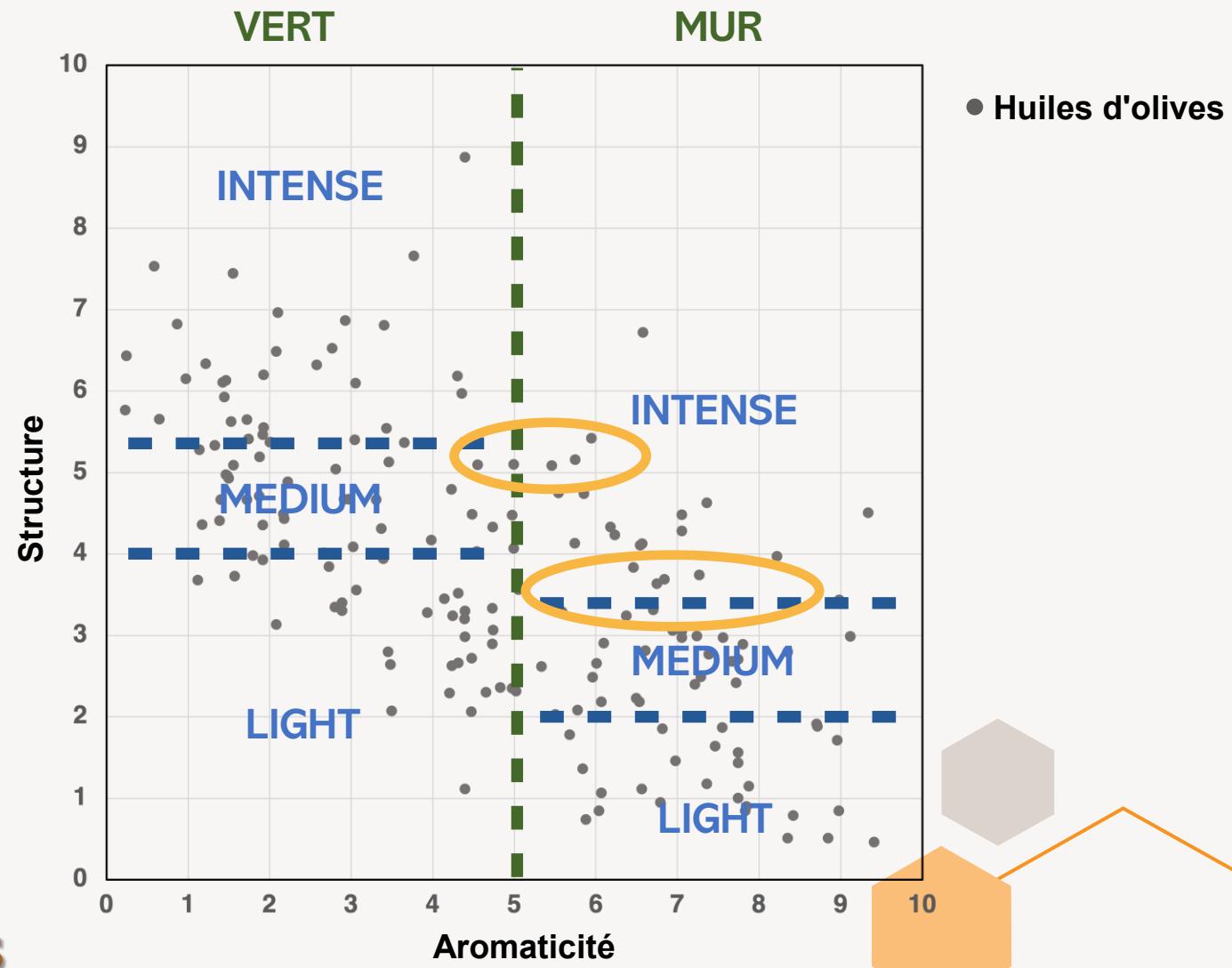


Séparation en fonction de la maturité aromatique



Séparation en fonction de l'intensité

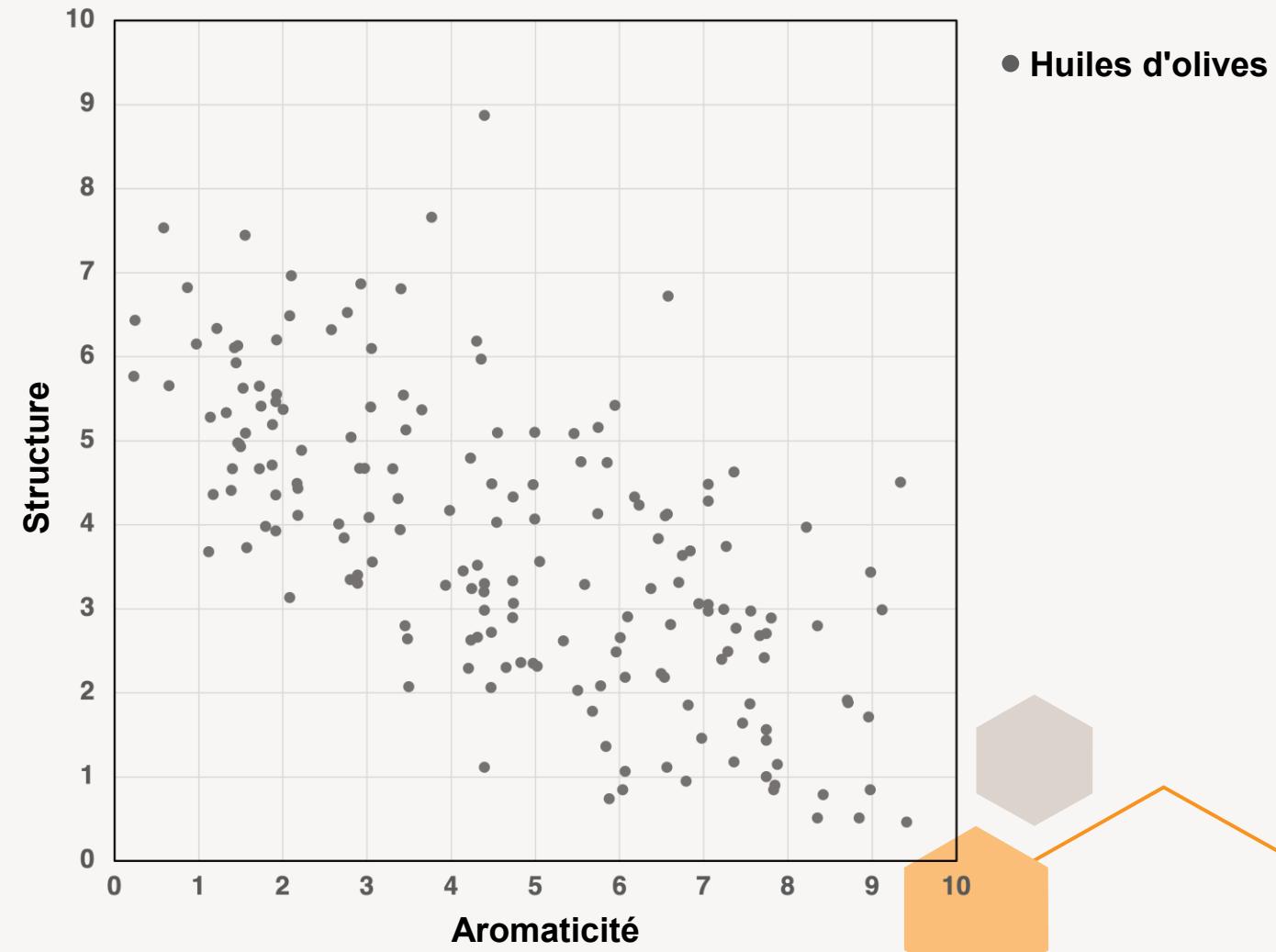
Problème de frontières



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive
dans l'espace des descripteurs

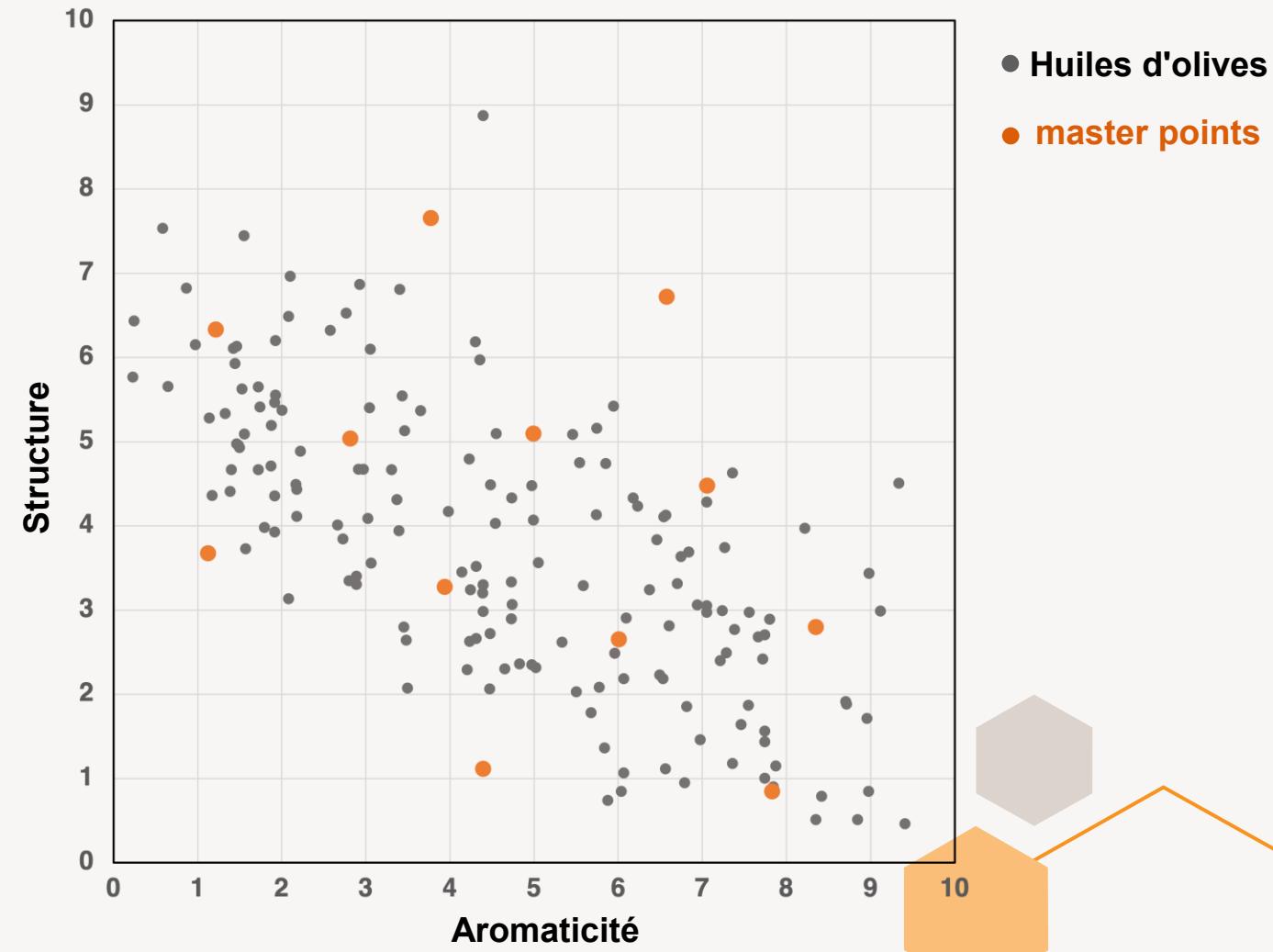
Algorithme WSP



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

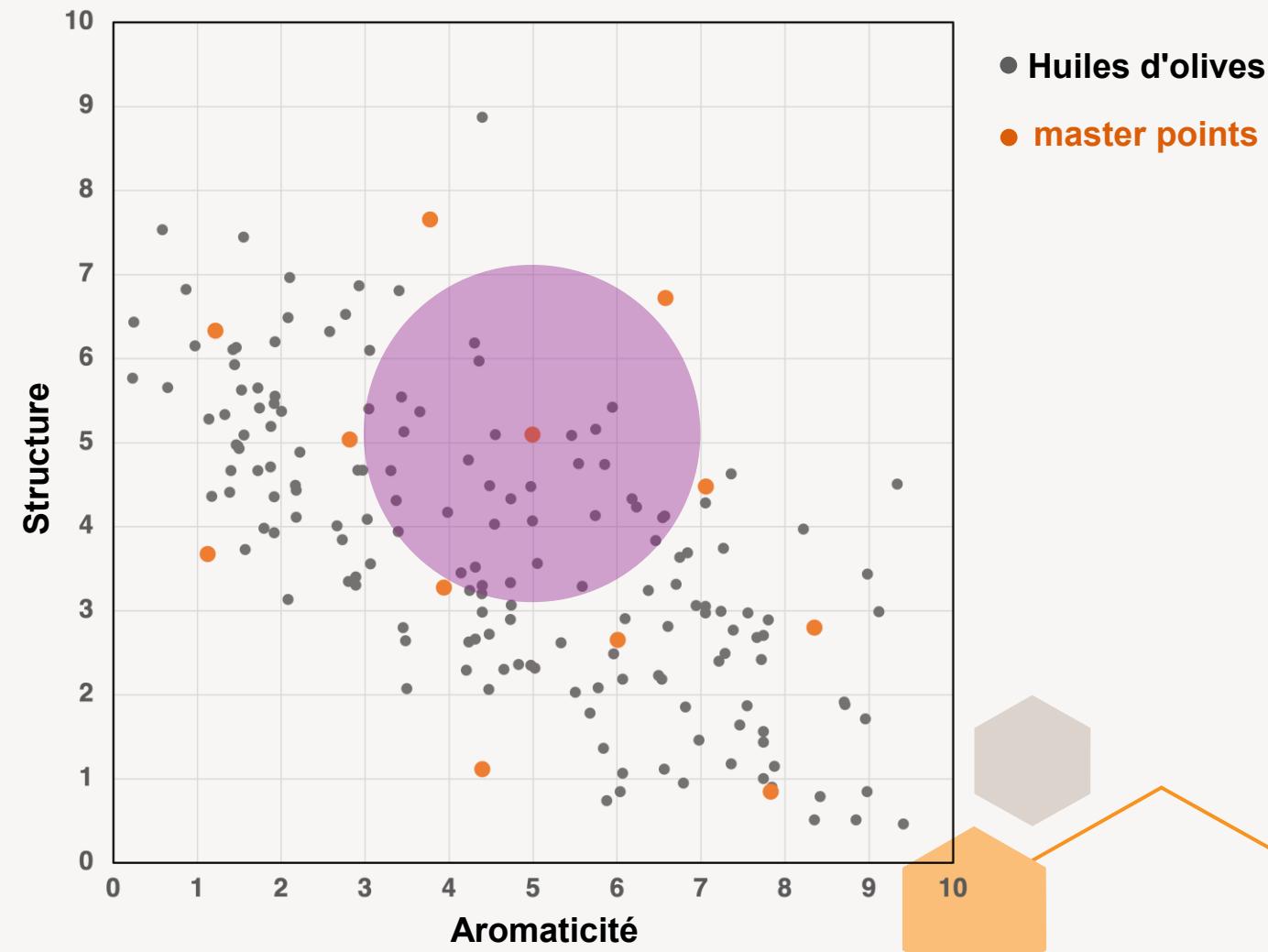


3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison

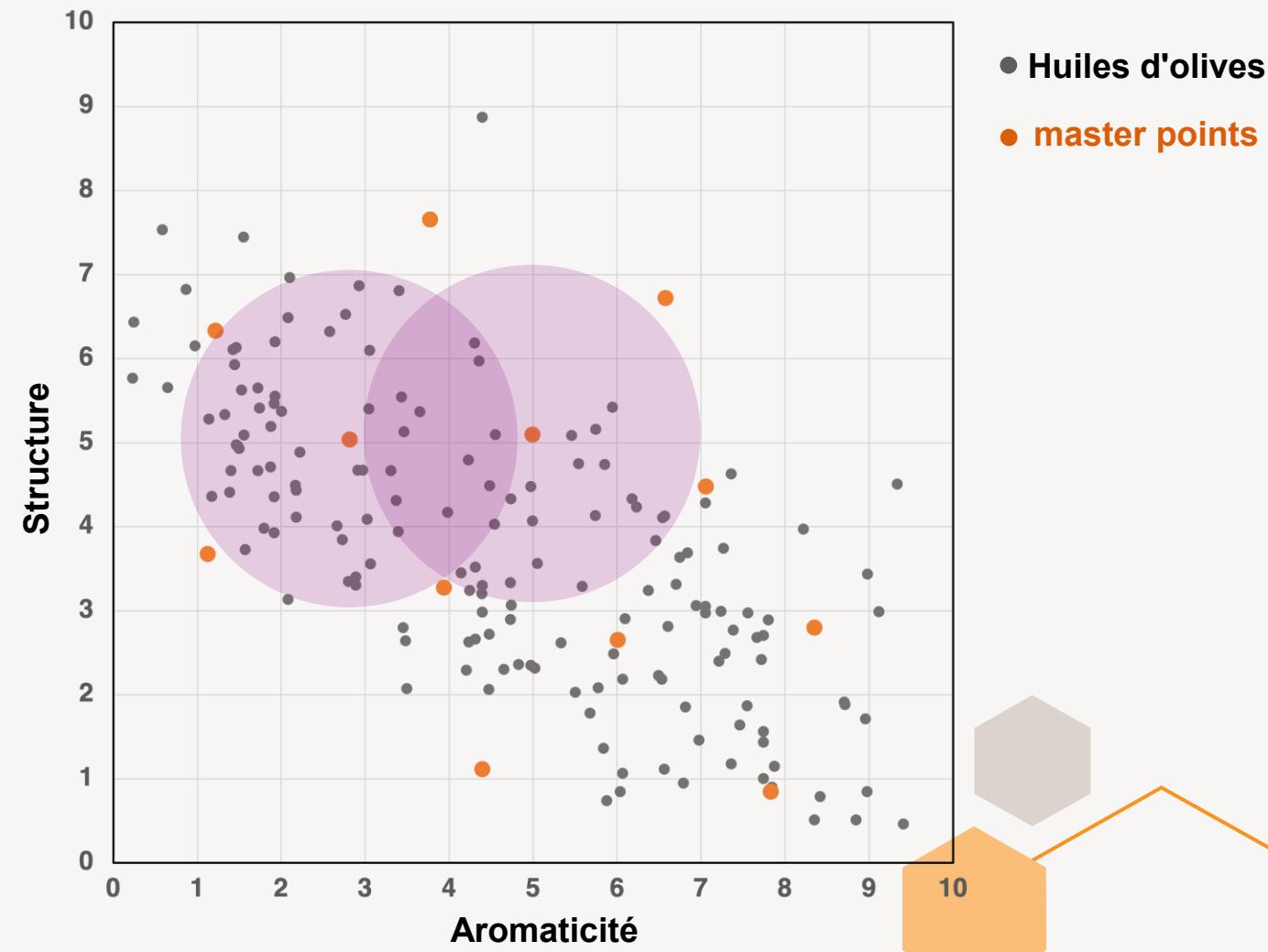


3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Algorithme WSP
Définition des espaces de comparaison

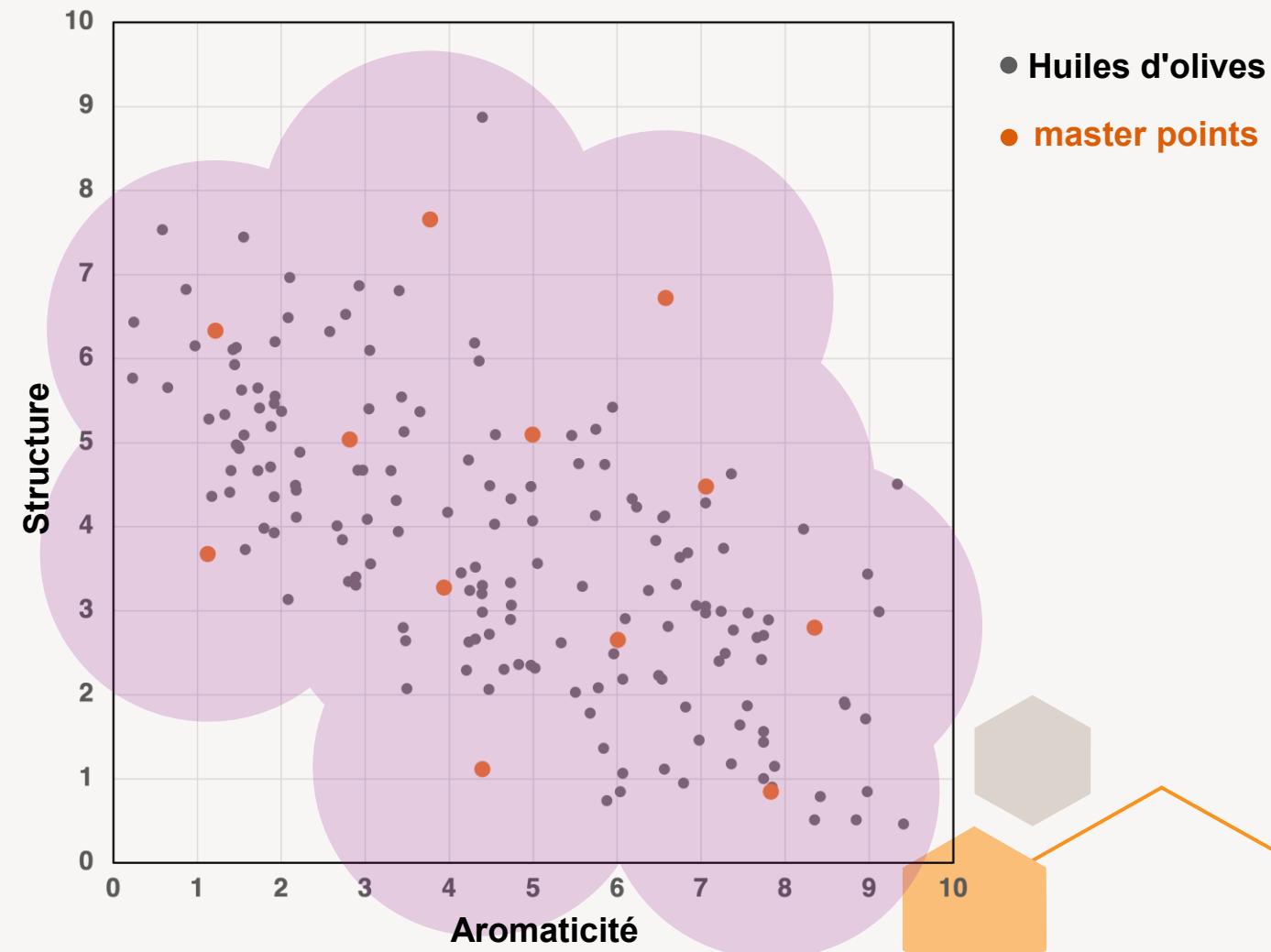


3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison



3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

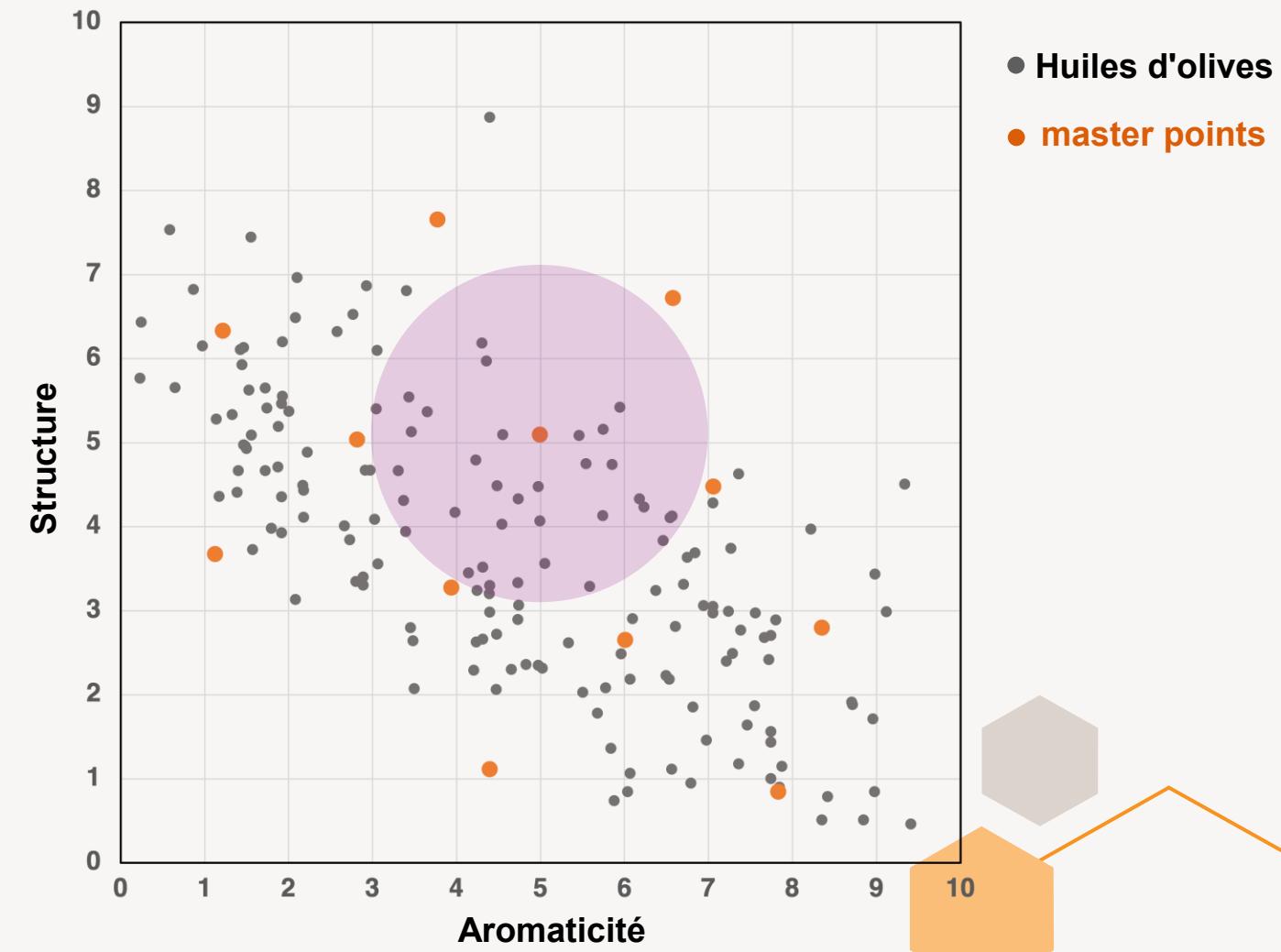
Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison

Sélection de 20% huiles sur le critère du fruité

Olive oil id.	Structure (/10)	Aromatic maturity (/10)	Fruitiness (/20)
1	5,65	1,72	16,3
2	2,23	6,50	13,5
3	0,787	8,42	11,4
4	2,99	7,24	12,4



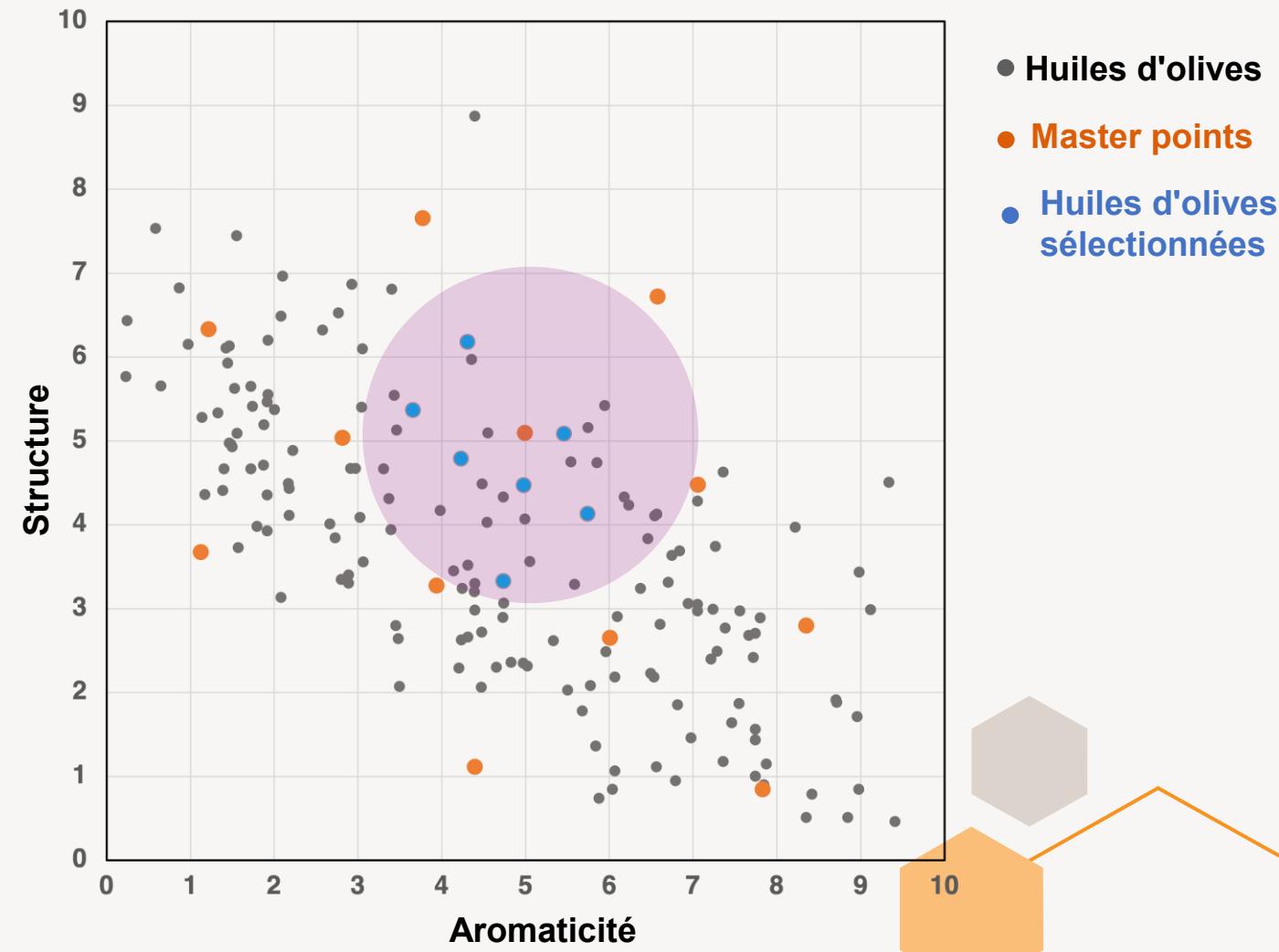
3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison

Sélection de 20% huiles sur le critère du fruité



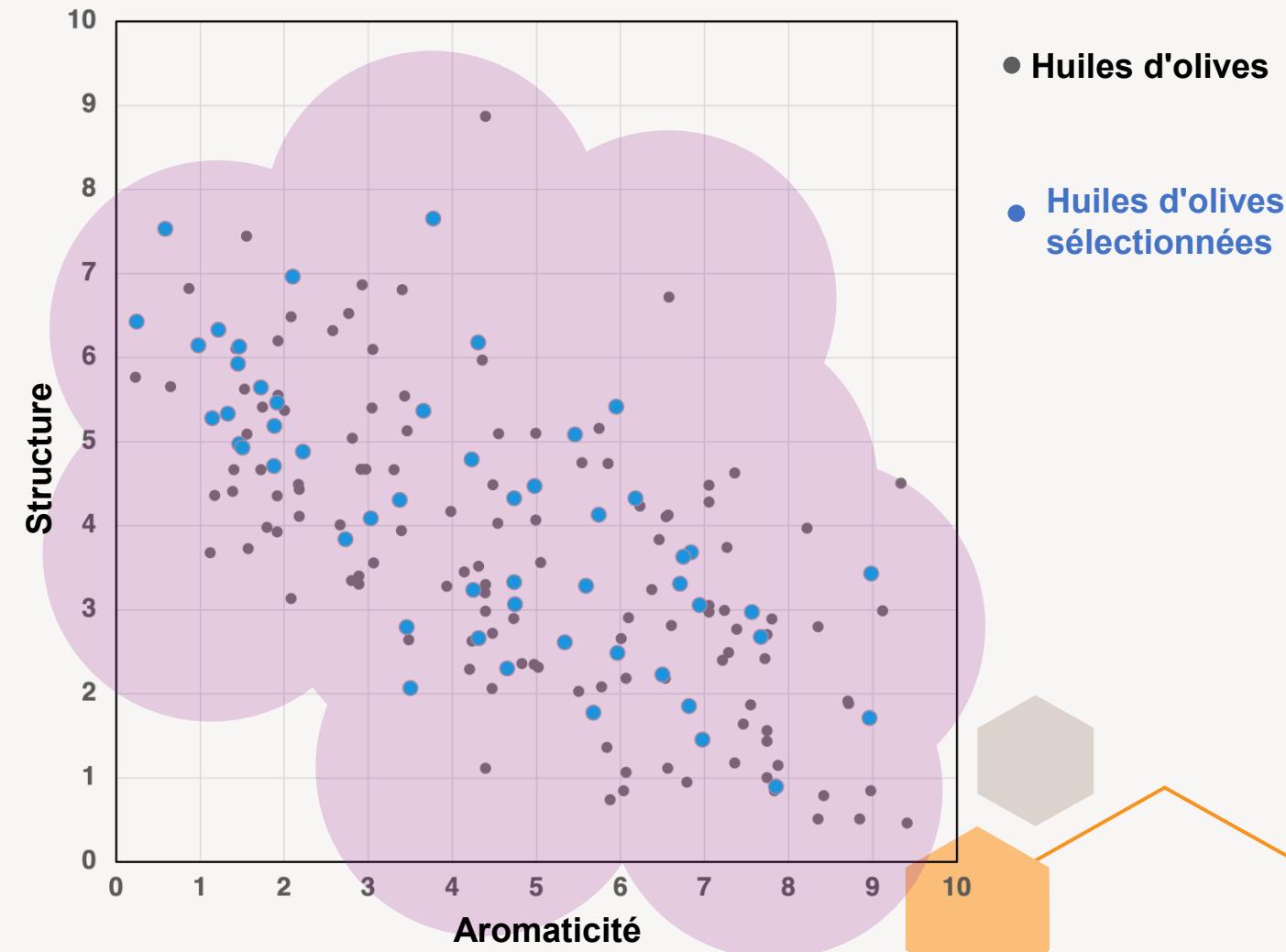
3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison

Sélection de 20% huiles sur le critère du fruité



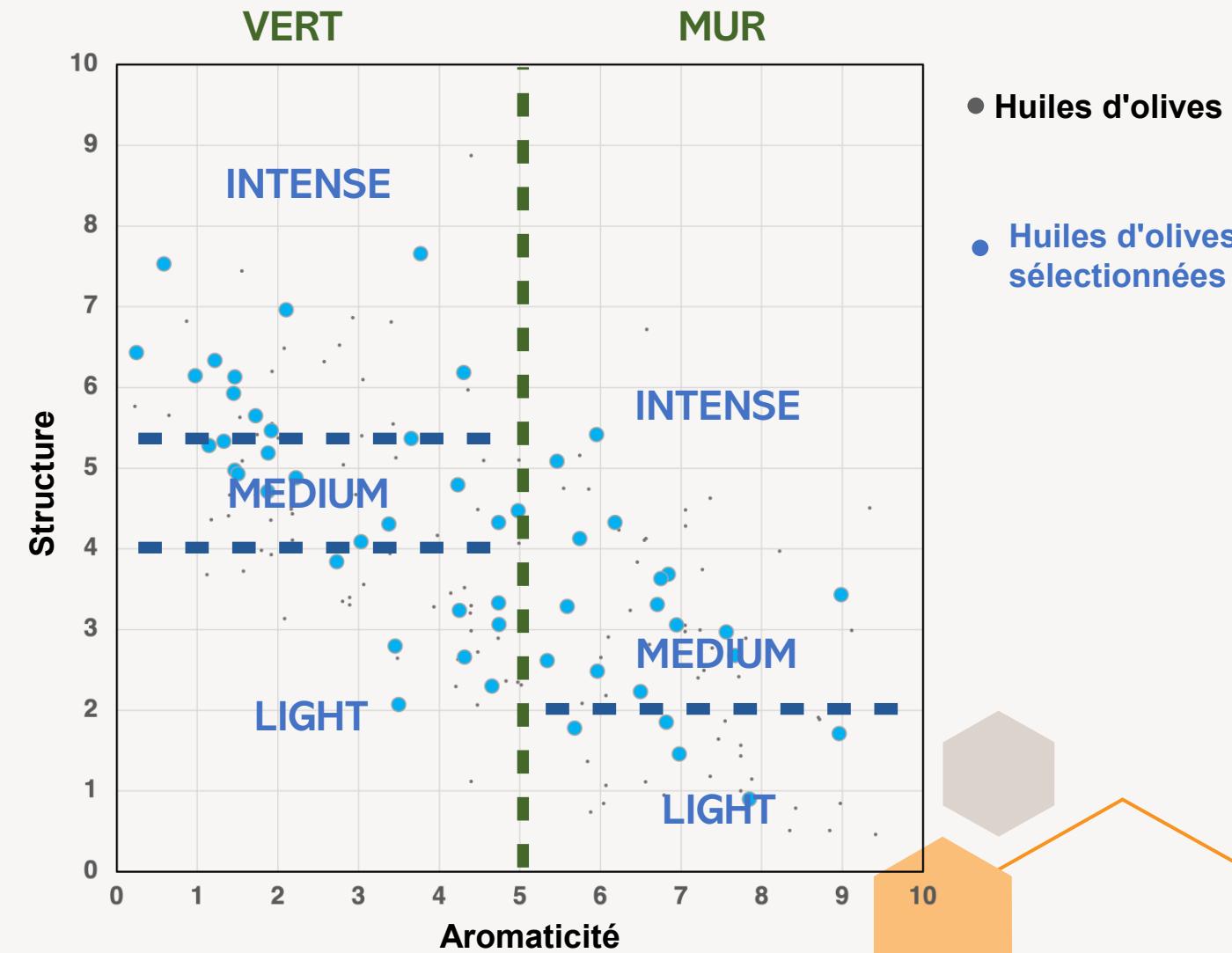
3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Distribution des huiles d'olive dans l'espace des descripteurs

Définition des Master points "maitres" répartis uniformément

Définition des espaces de comparaison

Sélection de 20% huiles sur le critère du fruité



Plus de discrimination en fonction des frontières

3.1 Applications : Sélection d'huiles d'olive

Approche WSP

une aide précieuse pour la sélection des meilleures huiles d'olive vierges extra



L'échantillon d'huile d'olive d'un producteur est comparé à des échantillons présentant des propriétés organoleptiques similaires.

Cette méthodologie élimine les problèmes liés aux limites entre les catégories de fruité, ce qui augmente les chances pour un échantillon d'huile d'être sélectionné, contrairement à d'autres concours.

L'approche WSP peut être transposée à d'autres applications impliquant un plus grand nombre de paramètres



1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP adaptatif

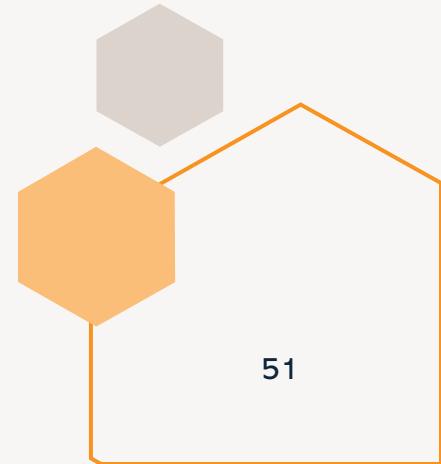
2.4 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

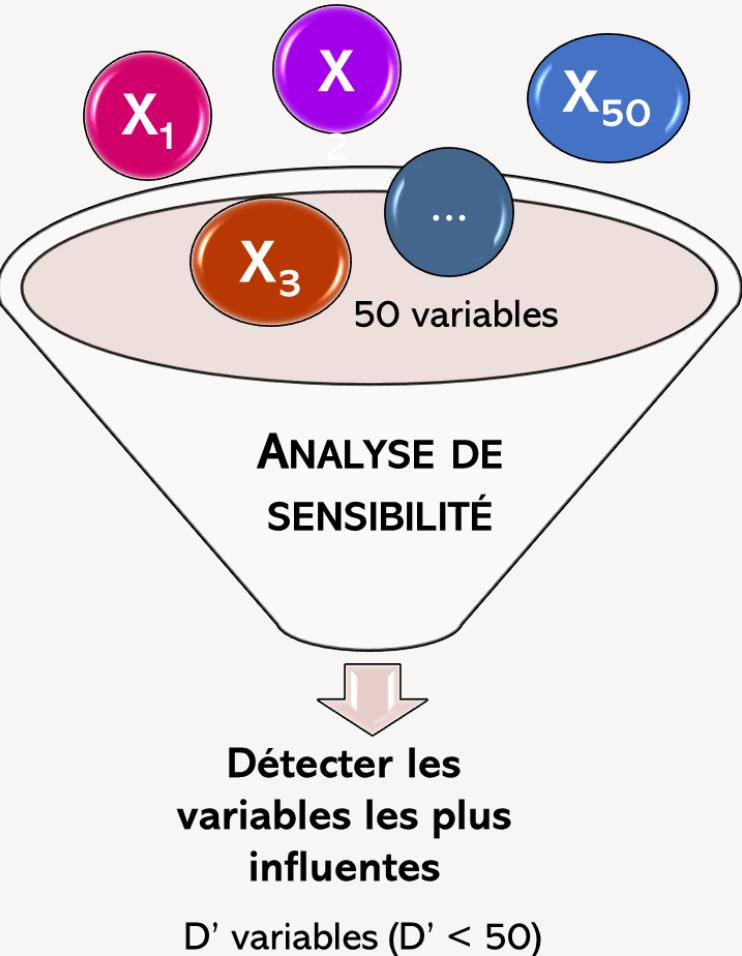
3.2 Deep learning



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences



Plan uniforme en 50D



	X_1	X_2	X_{50}
1							
2							
3							
.							
.							
.							
N							

Analyse de sensibilité



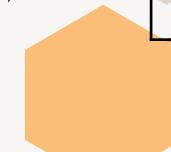
Détection des facteurs influents

	X_1	X_2	X_{50}
1							
2							
3							
.							
.							
.							
N							

Plans en D' dimensions

	X_2	...	$X_{D'}$
1			
2			
3			
.			
.			
.			
N			

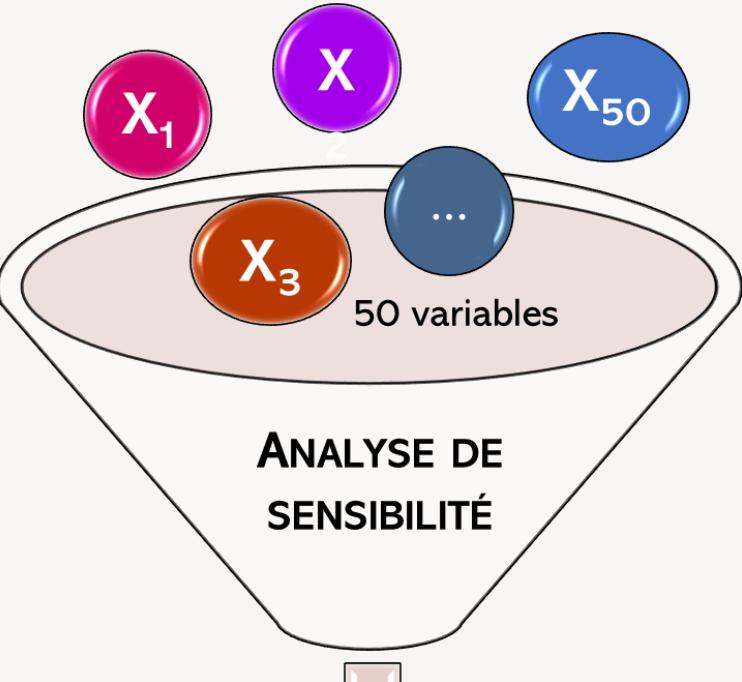
Repliage



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences



Plan uniforme en 50D



Déetecter les variables les plus influentes

D' variables ($D' < 50$)

	X_1	X_2	X_{50}
1							
2							
3							
.							
.							
.							
N							

Analyse de sensibilité



Détection des facteurs influents

	X_1	X_2	X_{50}
1							
2							
3							
.							
.							
.							
N							

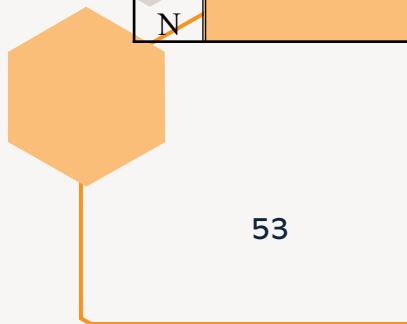
L'UNIFORMITÉ



Plans en D' dimensions

	X_2	...	$X_{D'}$
1			
2			
3			
.			
.			
.			
N			

Repliage



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences

Matrices initiales
50D – 100 points

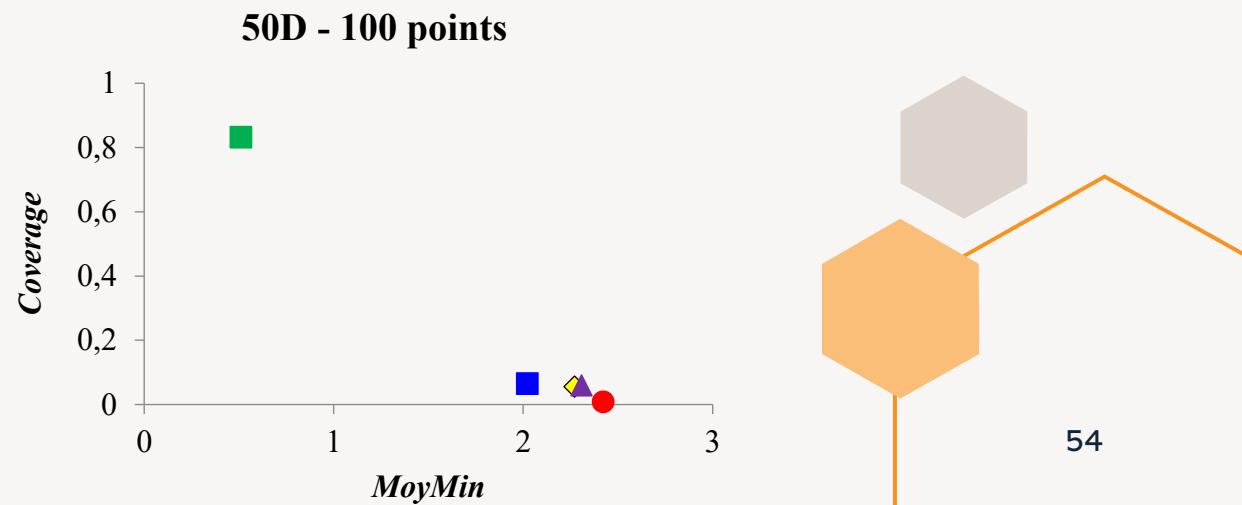
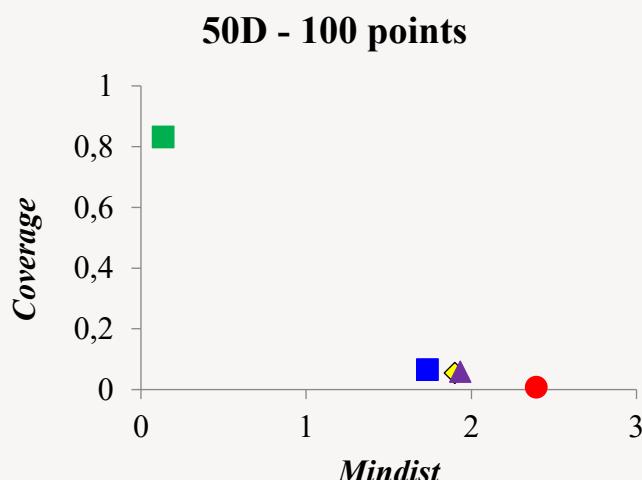
- ◊ Matrice aléatoire
- Suite de Sobol
- Suite de Faure
- ▲ rLHS
- Plan WSP

Calcul des critères intrinsèques des plans en 50D
"Repliage" dans l'espace de dimension D' ($D' \leq 50$)
 $D'=12$
 $D'=25$
 $D'=37$

Calcul des critères intrinsèques des plans repliés

Elimination des amas

Comblement des lacunes



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences

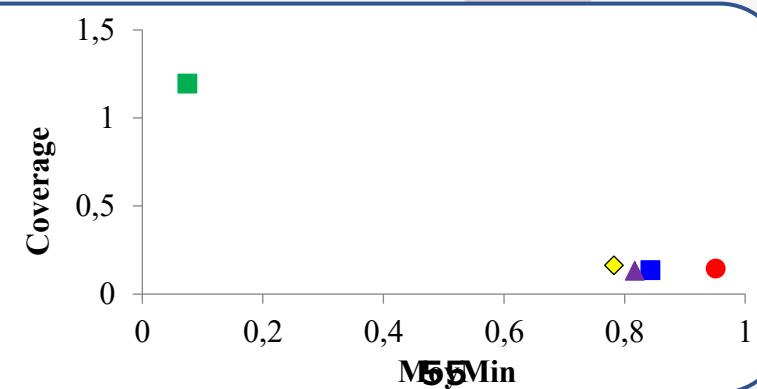
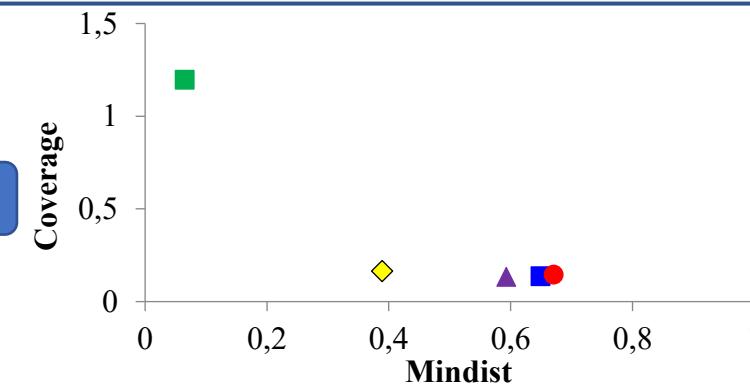
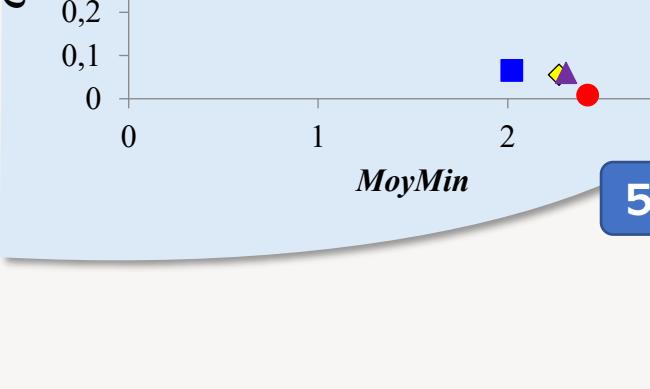
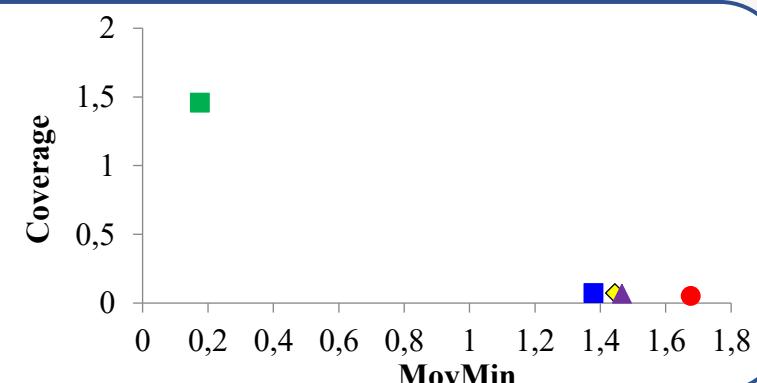
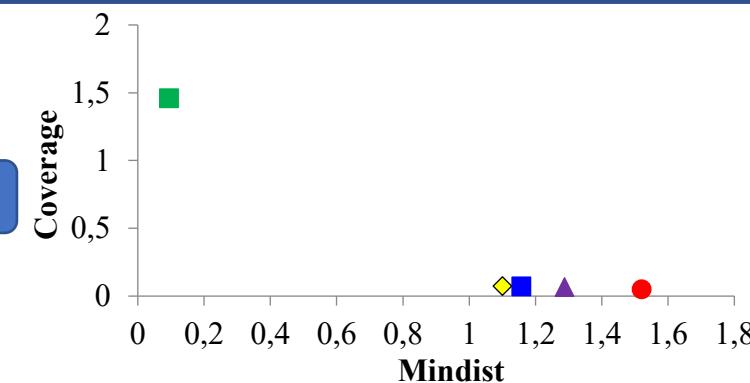
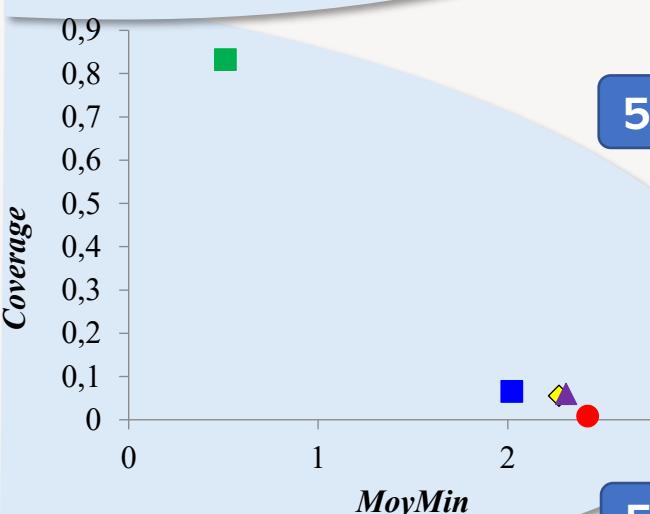
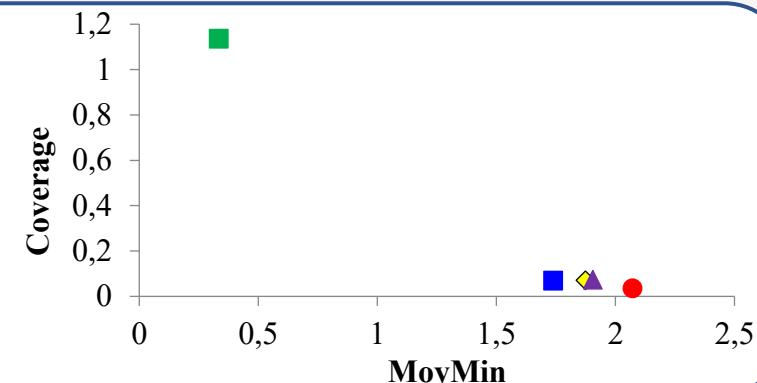
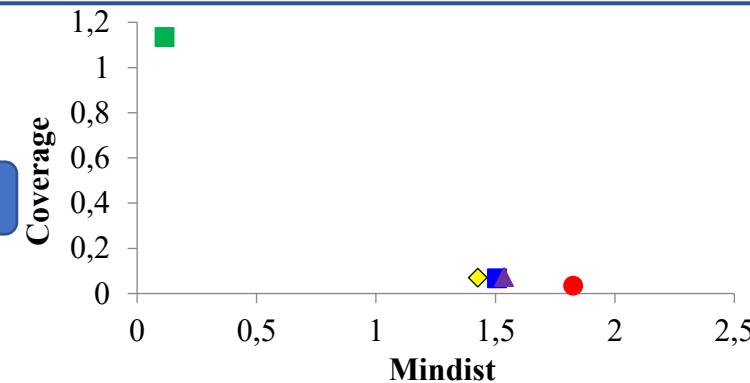
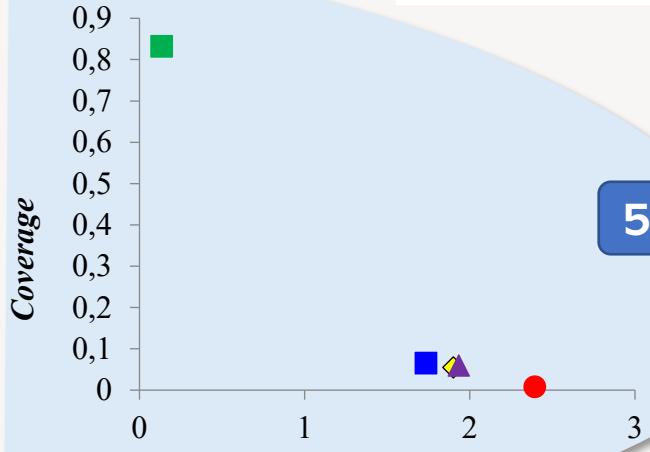
◆ Matrice aléatoire

■ Suite de Sobol

■ Suite de Faure

▲ rLHS

● Plan WSP



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences

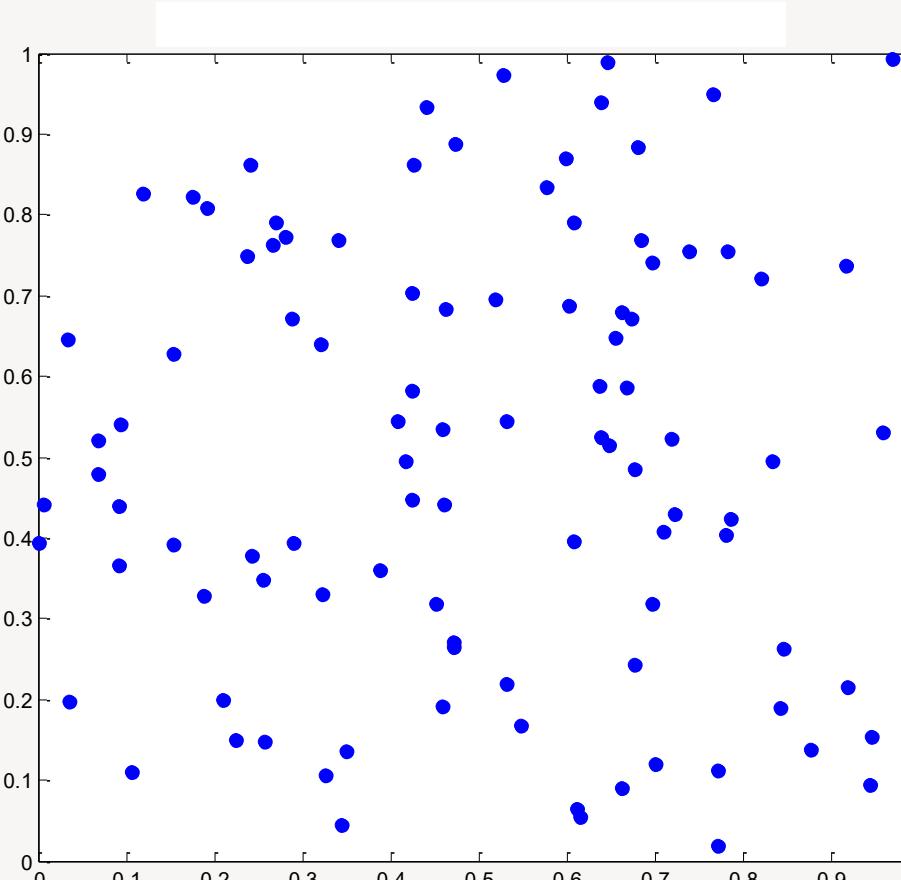
Algorithme d'élimination des
amas de points = WSP

Considérer un ensemble de
points candidats

↓
Construire un plan de "
référence" en même dimension
avec le même nombre de points

↓
Calculer la valeur *Mindist*
du plan de " référence "

↓
Appliquer l'algorithme WSP sur
le plan étudié avec $d_{min} =$
 $Mindist_{ref}$



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences

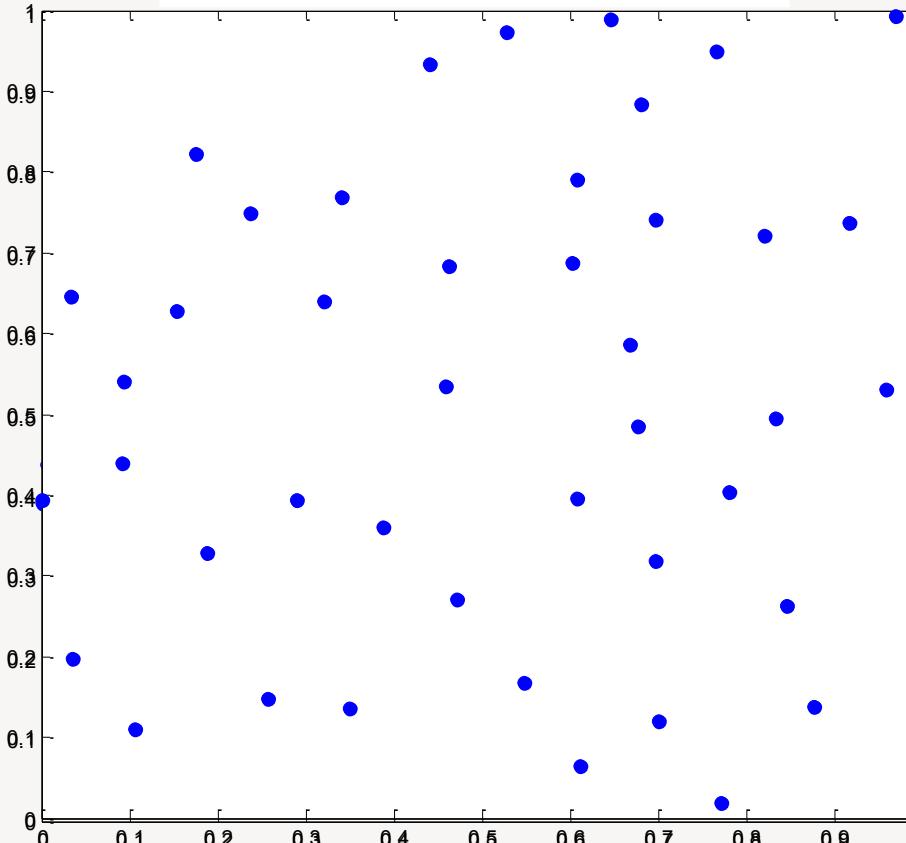
Algorithme d'élimination des
amas de points = WSP

Considérer un ensemble de
points candidats

↓
Construire un plan de "
référence" en même dimension
avec le même nombre de points

↓
Calculer la valeur *Mindist*
du plan de " référence "

↓
Appliquer l'algorithme WSP sur
le plan étudié avec $d_{min} =$
 $Mindist_{ref}$



3.2 Applications : Réparation de plan d'expériences

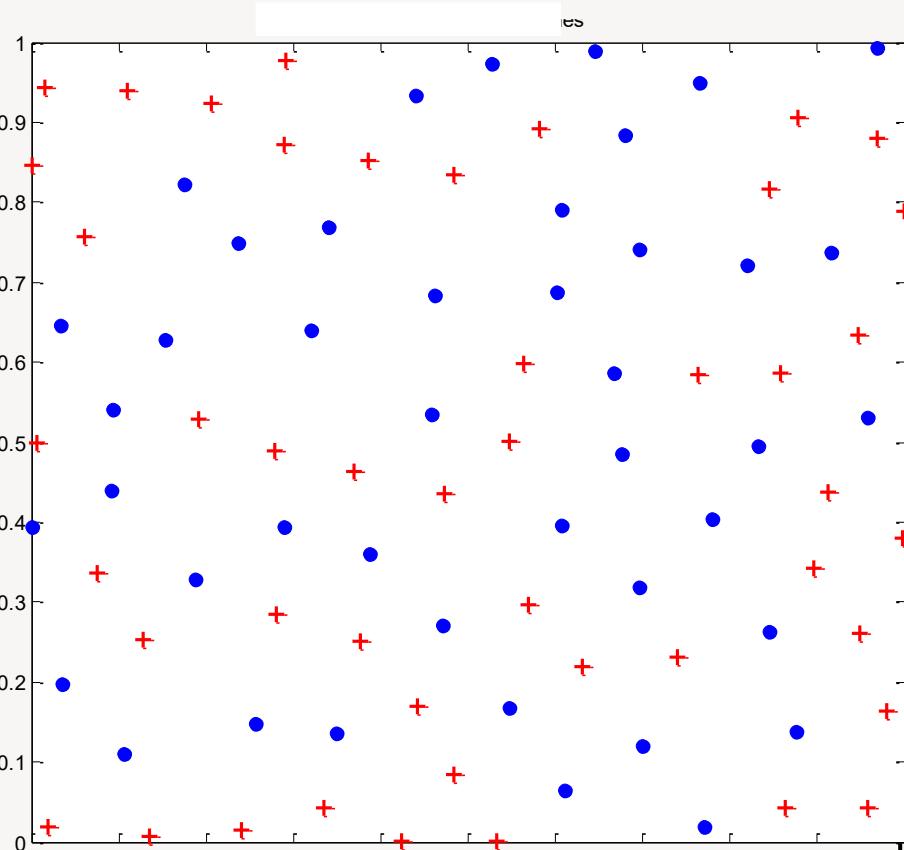
Algorithme d'élimination des amas de points = WSP

Considérer un ensemble de points candidats

Construire un plan de "référence" en même dimension avec le même nombre de points

Calculer la valeur *Mindist* du plan de "référence"

Appliquer l'algorithme WSP sur le plan étudié avec $d_{min} = Mindist_{ref}$



Algorithme de comblement des lacunes = WSP PROTEGE

Soit un ensemble de points protégés P

Considérer un ensemble de points candidats C

Concaténer les deux ensembles de points

Fixer une valeur d_{min} puis éliminer tous les points C tels que $D_{PC} < d_{min}$

Appliquer l'algorithme WSP en considérant un point protégé comme point initial, noté O

Éliminer les points C tels que $D_{OC} < d_{min}$

Remplacer le point O par le point le plus proche parmi l'ensemble des points restants

Répéter la procédure jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de points candidats



1. DOE - Généralités

2. Les plans uniformes

2.1 Algorithme WSP

2.2 Algorithme WSP protégé

2.3 Algorithme WSP adaptatif

2.4 Algorithme V-WSP

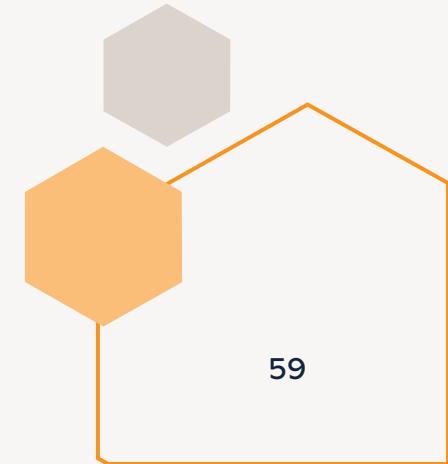
2.5 Algorithme WSP pour les mélanges

3. Applications

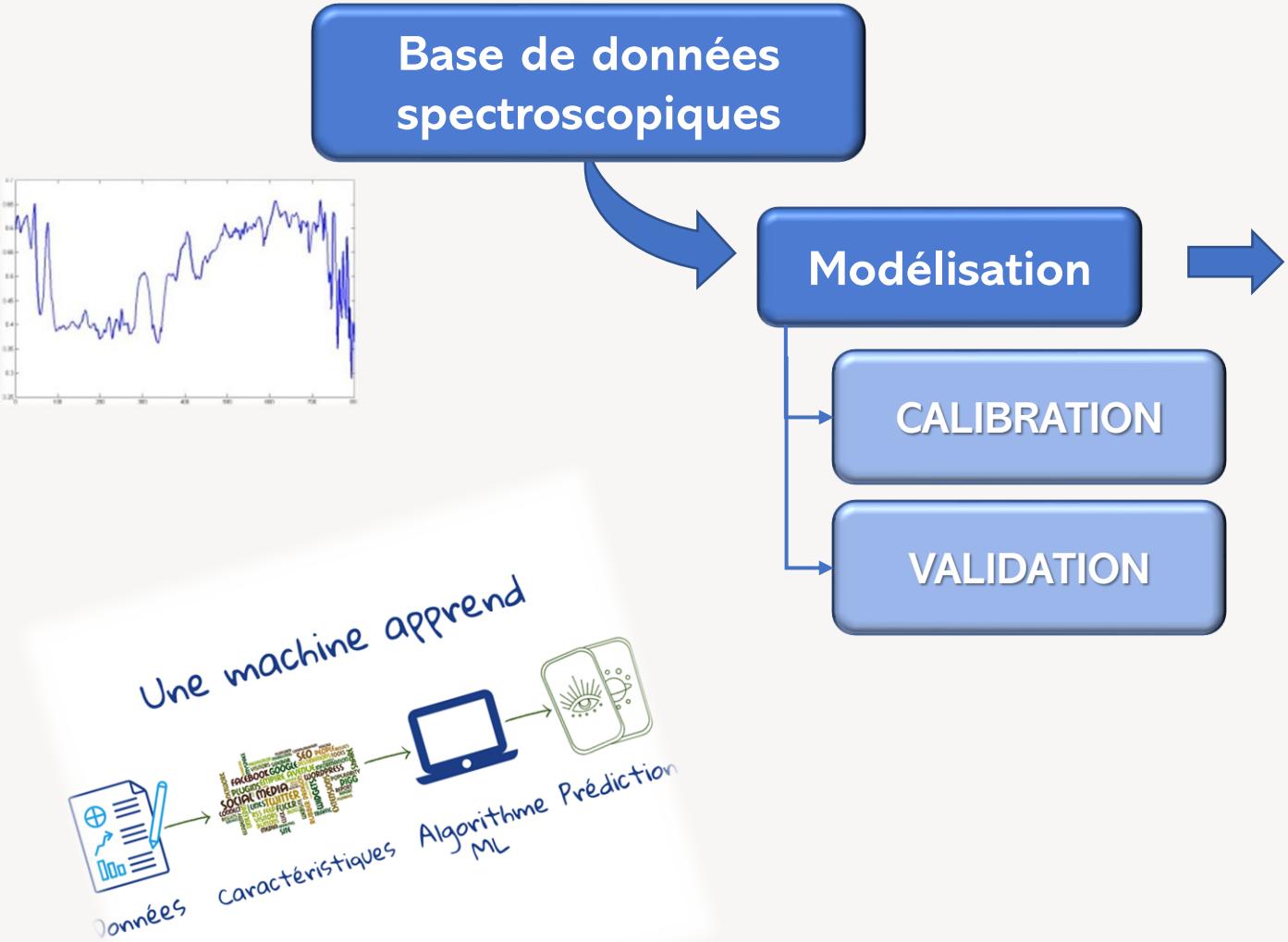
3.1 Huiles d'Olive

3.2 Réparation

3.3 Deep learning



3.3 Applications : Deep learning



**Extraire des sous-ensembles
en conservant une information de
bonne qualité**

Méthodes de
sélection de points

Principe : *répartir uniformément les
points dans l'espace*

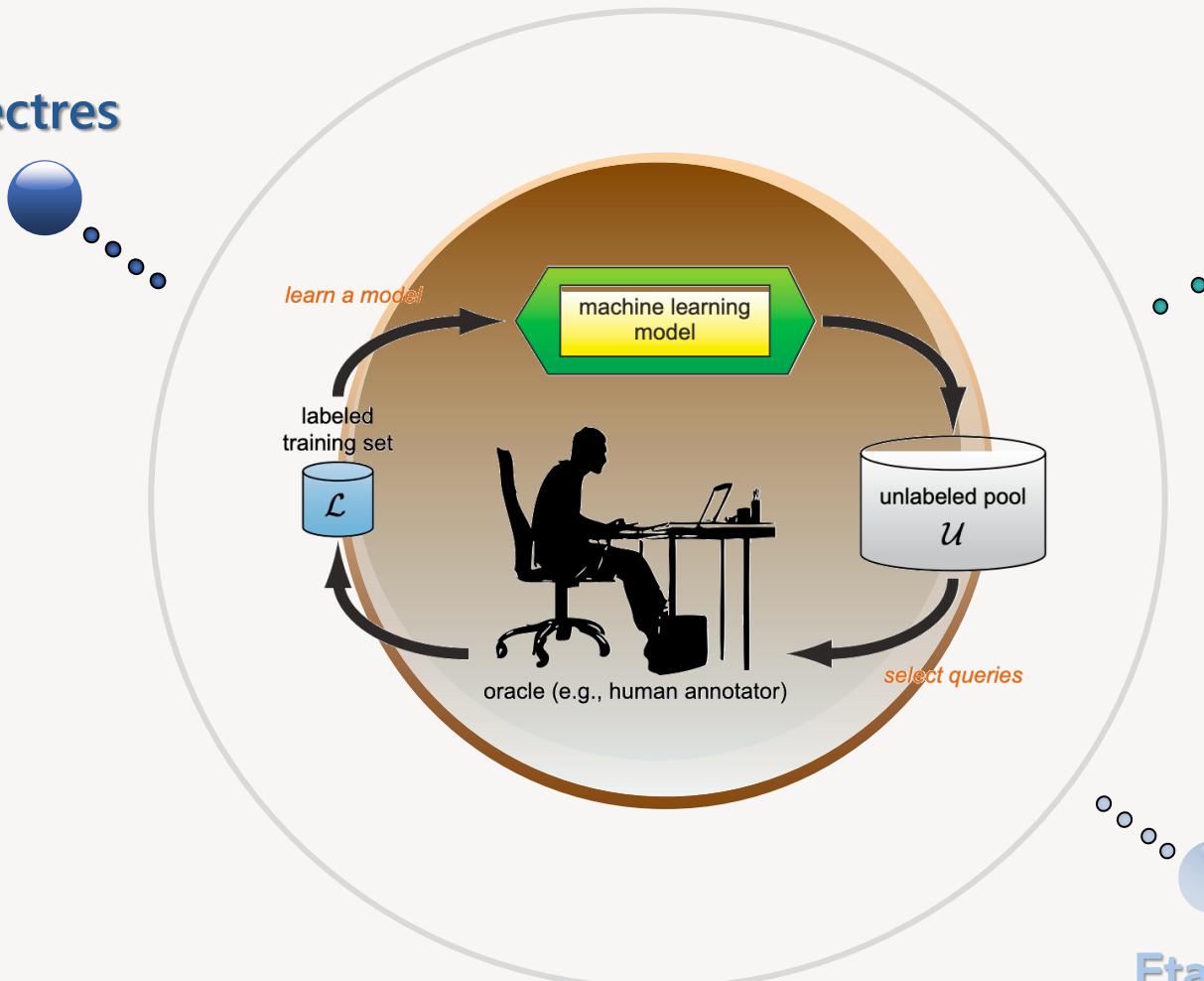
- WSP
- Kennard et Stone
- Duplex
- OptiSim
- DBOD
- ...



3.3 Applications : Deep learning

Etape 3

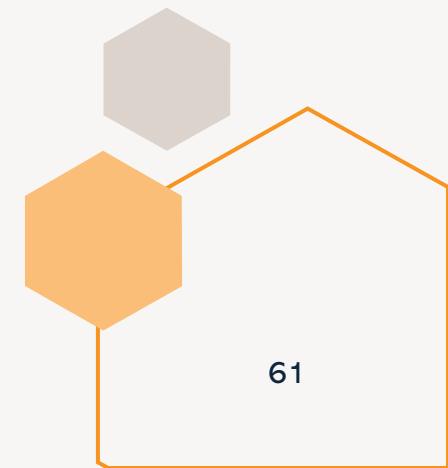
Modèle RN avec N spectres



Etape 1

Acquisition des spectres

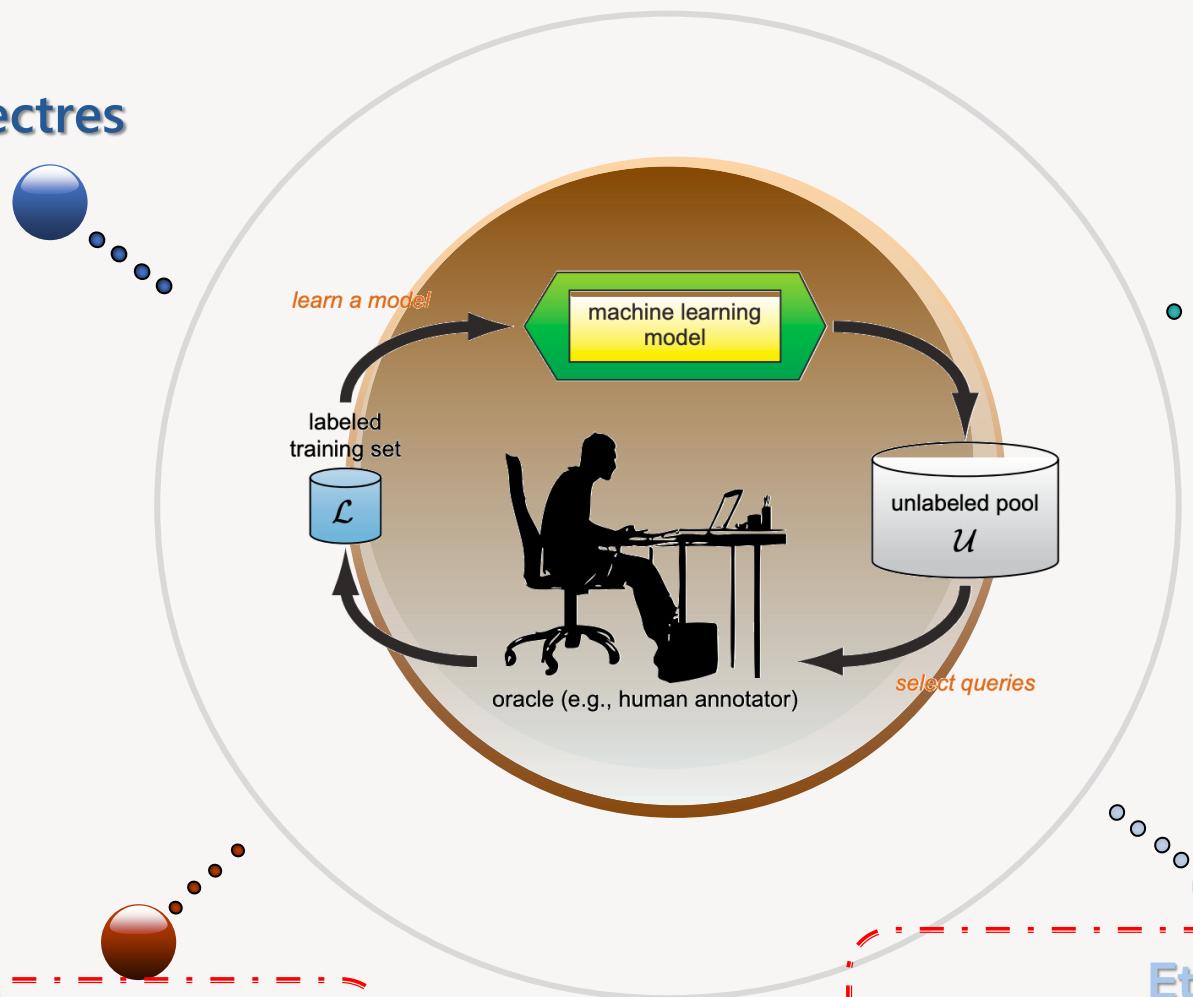
Etape 2
Sélection de N spectres
WSP



3.3 Applications : Deep learning

Etape 3

Modèle RN avec N spectres

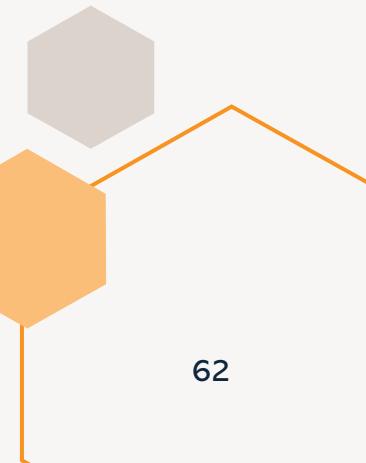


Etape 1

Acquisition des spectres

Etape 4

Prédiction en utilisant le modèle



Etape 5

Ajout de N' spectres
WSP protégé

Critères exploitation et d'exploration

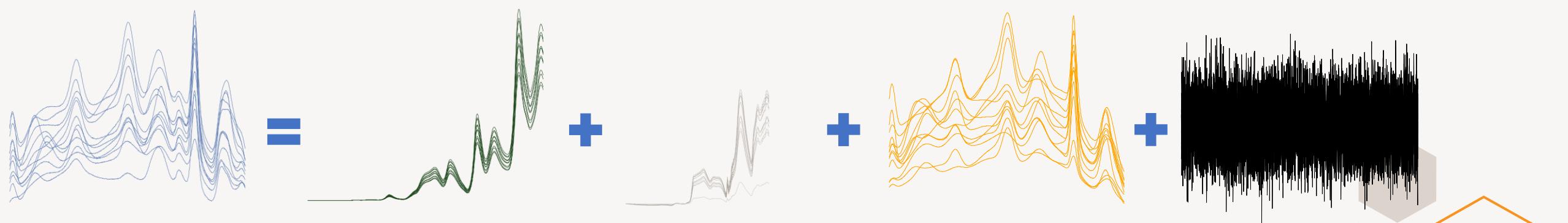
Etape 2

Sélection de N spectres WSP

3.3 Applications : Deep learning

Cas étude : cas simulé

- 500 Spectres entre 1100-2500 nm avec une résolution de 2 nm
- 400 spectres pour la calibration et 100 pour la validation et les tests
- Réponse : concentration en Glucose



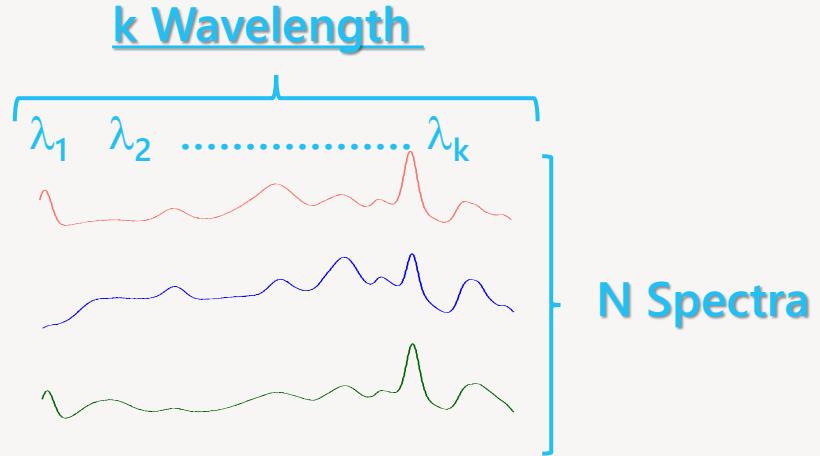
Spectra = Alcohol spectra + Glucose spectra + D.S + Noise



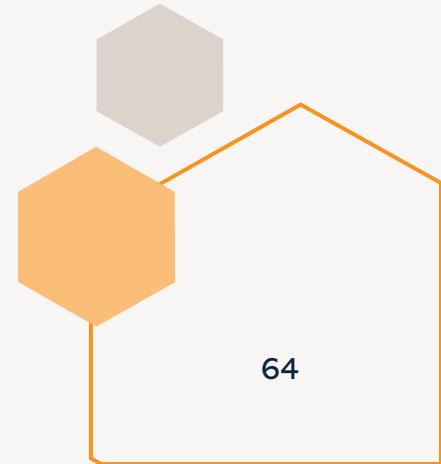
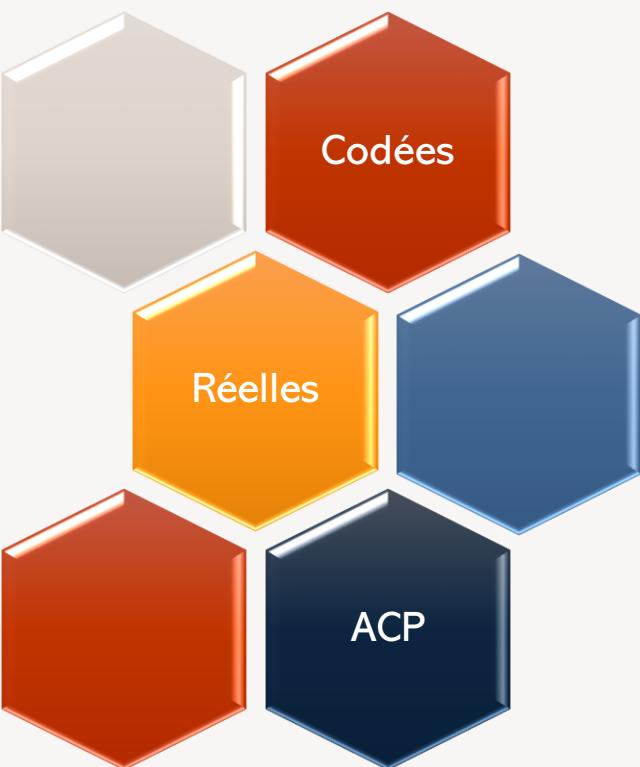
3.3 Applications : Deep learning

Etape 2

Sélection de N spectres
WSP



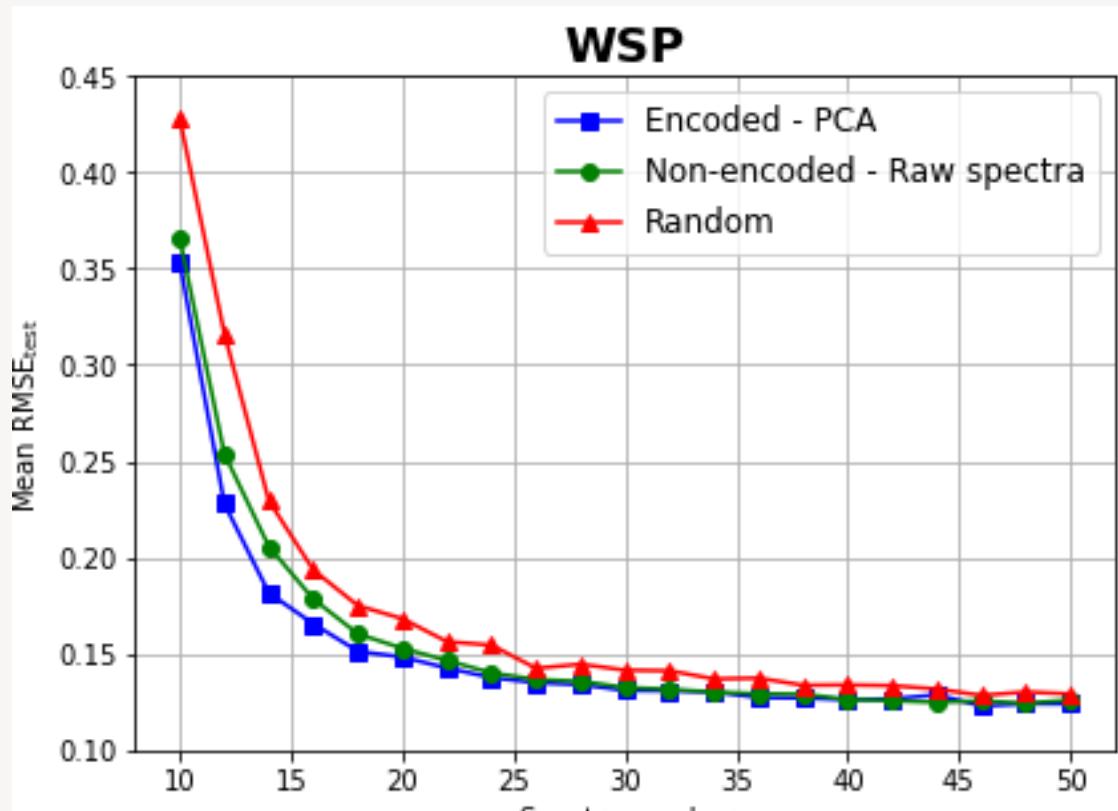
Comment sélectionner les
spectres ?? Quelles Variables



3.3 Applications : Deep learning

Etape 2

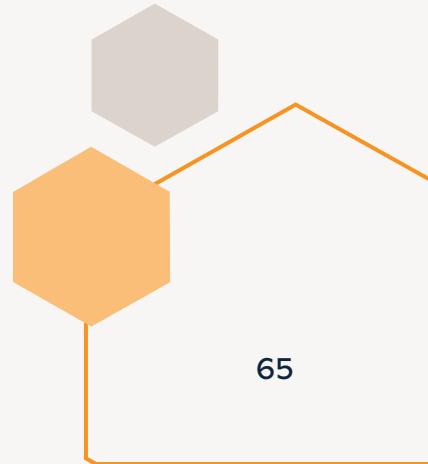
Sélection de N spectres
WSP



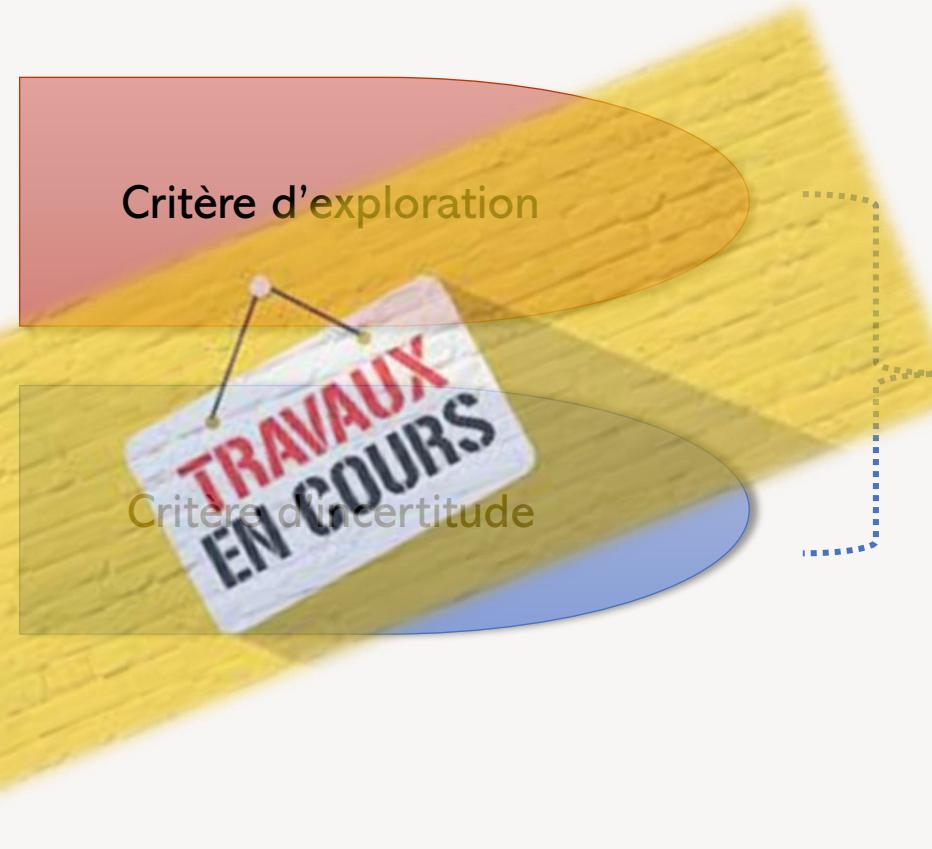
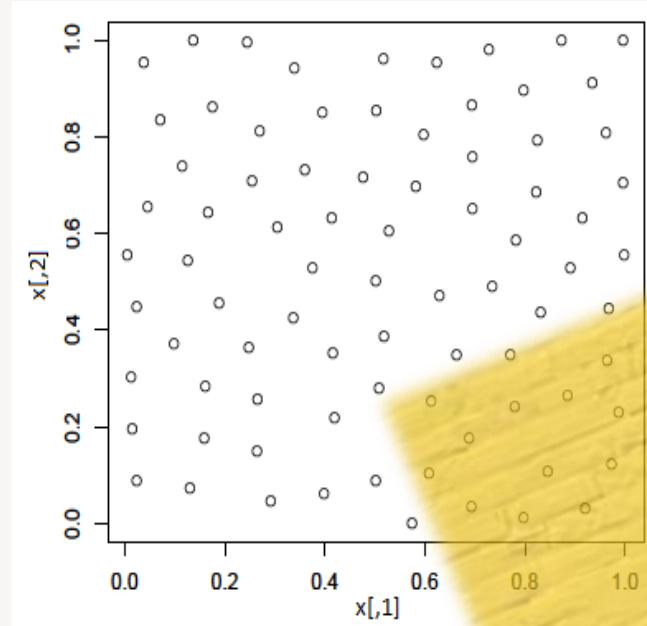
Sélection aléatoire

Sélection WSP sur spectres bruts

Sélection WSP après réduction de dimension

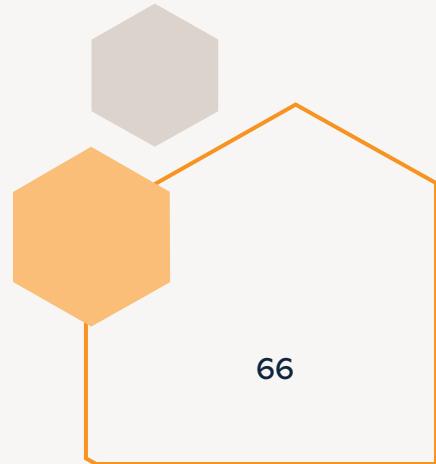


3.3 Applications : Deep learning



Etape 5
Ajout de N' spectres
WSP protégé
Critères exploitation et d'exploration

WSP
protégé
et
adaptatif





All the models are false,
but some of them are
more useful than others.

G.E.P. Box

Merci !



m.claeys-bruno@univ-amu.fr