Construction d'un métamodèle à sorties fonctionnelles

Benjamin Auder

CEA - UPMC

6 octobre 2009

Thèse depuis 02/2008

Directeur de thèse : Gérard Biau (UPMC)

Encadrant CEA : Bertrand Iooss (CEA)

Contexte industriel global

Cadre : durée de vie des cuves.

$\longrightarrow$ Diverses séquences d'accidents envisagées.

But : majorer la probabilité de chaque accident répertorié.

Contexte industriel global

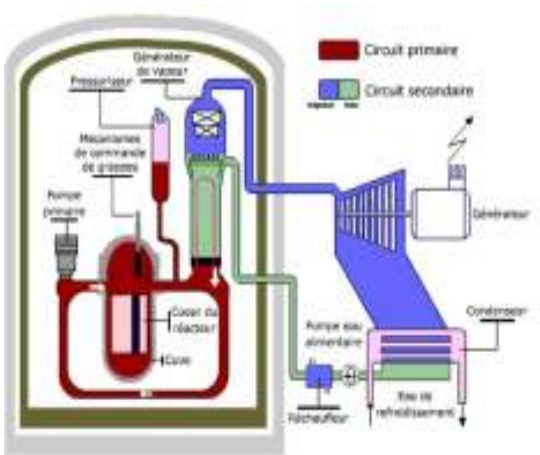
Cadre : durée de vie des cuves.

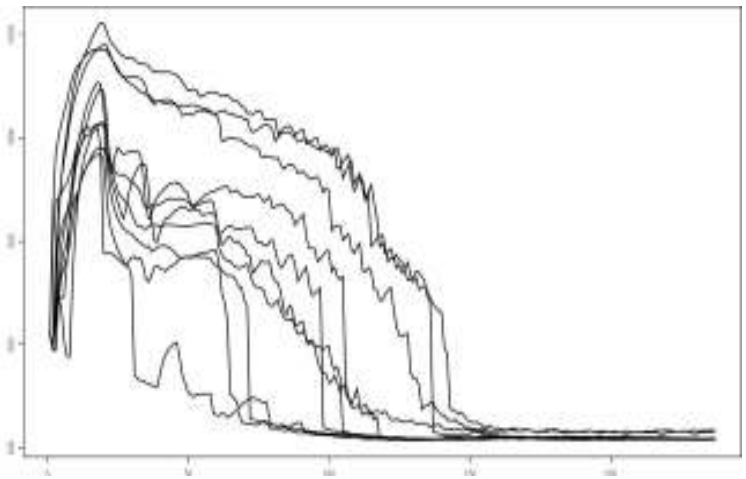
$\longrightarrow$ Diverses séquences d'accidents envisagées.

But : majorer la probabilité de chaque accident répertorié.

Méthodologie

Modélisation $\longrightarrow$ Simulation $\longrightarrow$ Calculs.





$\longrightarrow$ Analyse de sensibilité, propagation d'incertitudes ..etc.

Contexte industriel global

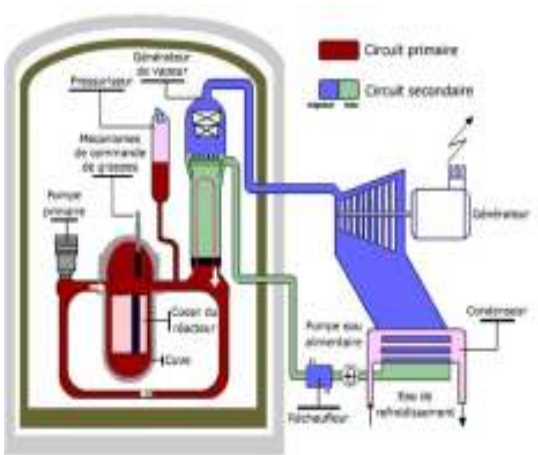
Cadre : durée de vie des cuves.

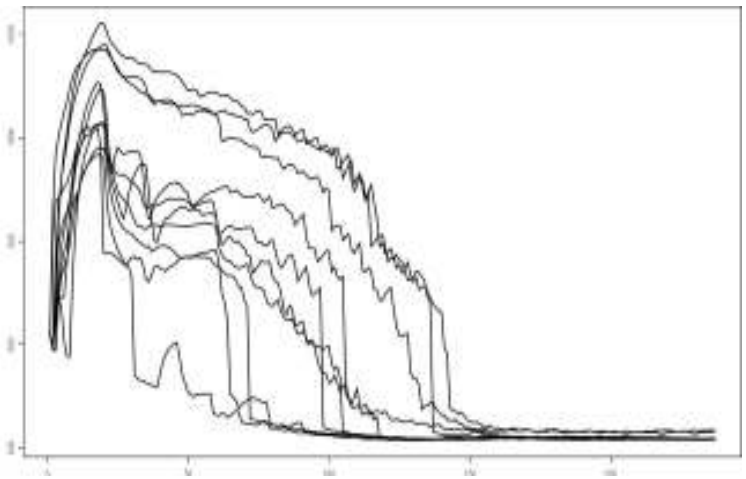
$\longrightarrow$ Diverses séquences d'accidents envisagées.

But : majorer la probabilité de chaque accident répertorié.

Méthodologie

Modélisation $\longrightarrow$ Simulation $\longrightarrow$ Calculs.





$\longrightarrow$ Analyse de sensibilité, propagation d'incertitudes ..etc.

Améliorer la phase simulation, pour effectuer des calculs plus fiables.

Motivations au DER/SESI/LCFR

Cathare (CEA)

Code thermo-hydraulique coûteux en temps, déterminant les évolutions temporelles de paramètres physiques dans l'espace annulaire de la cuve.

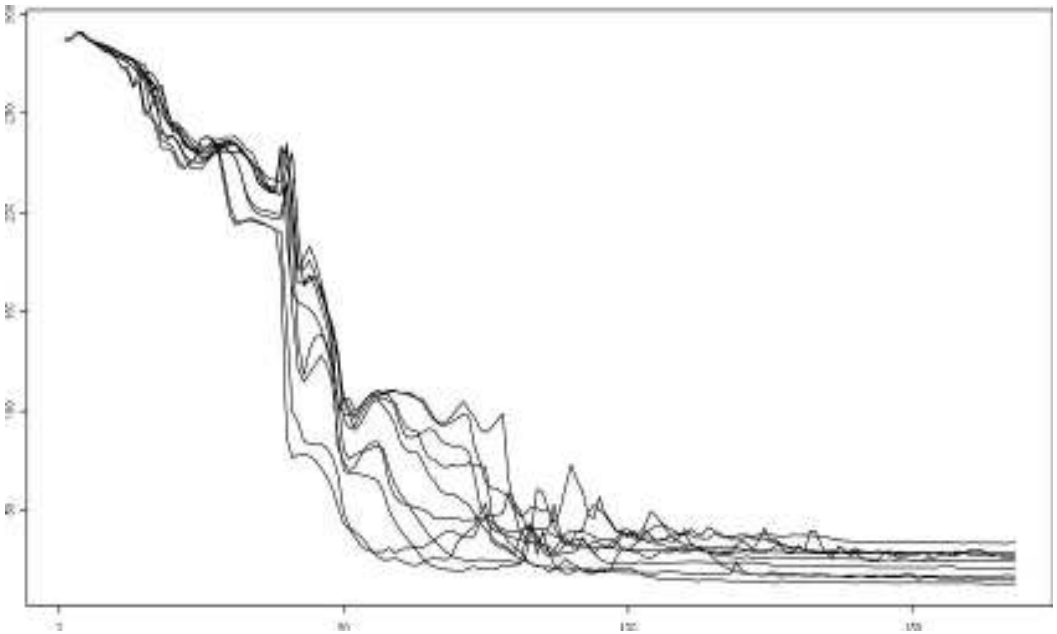


FIG.: Transitoires de température.

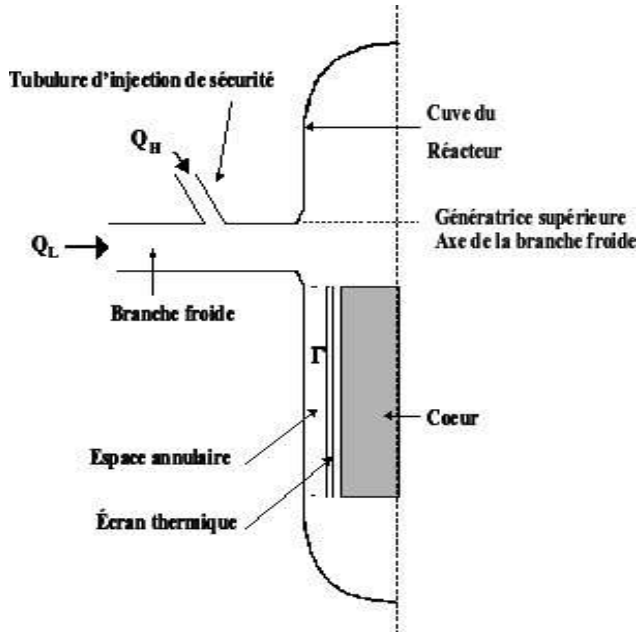


FIG.: Zone modélisée

Intérêt d'un métamodèle

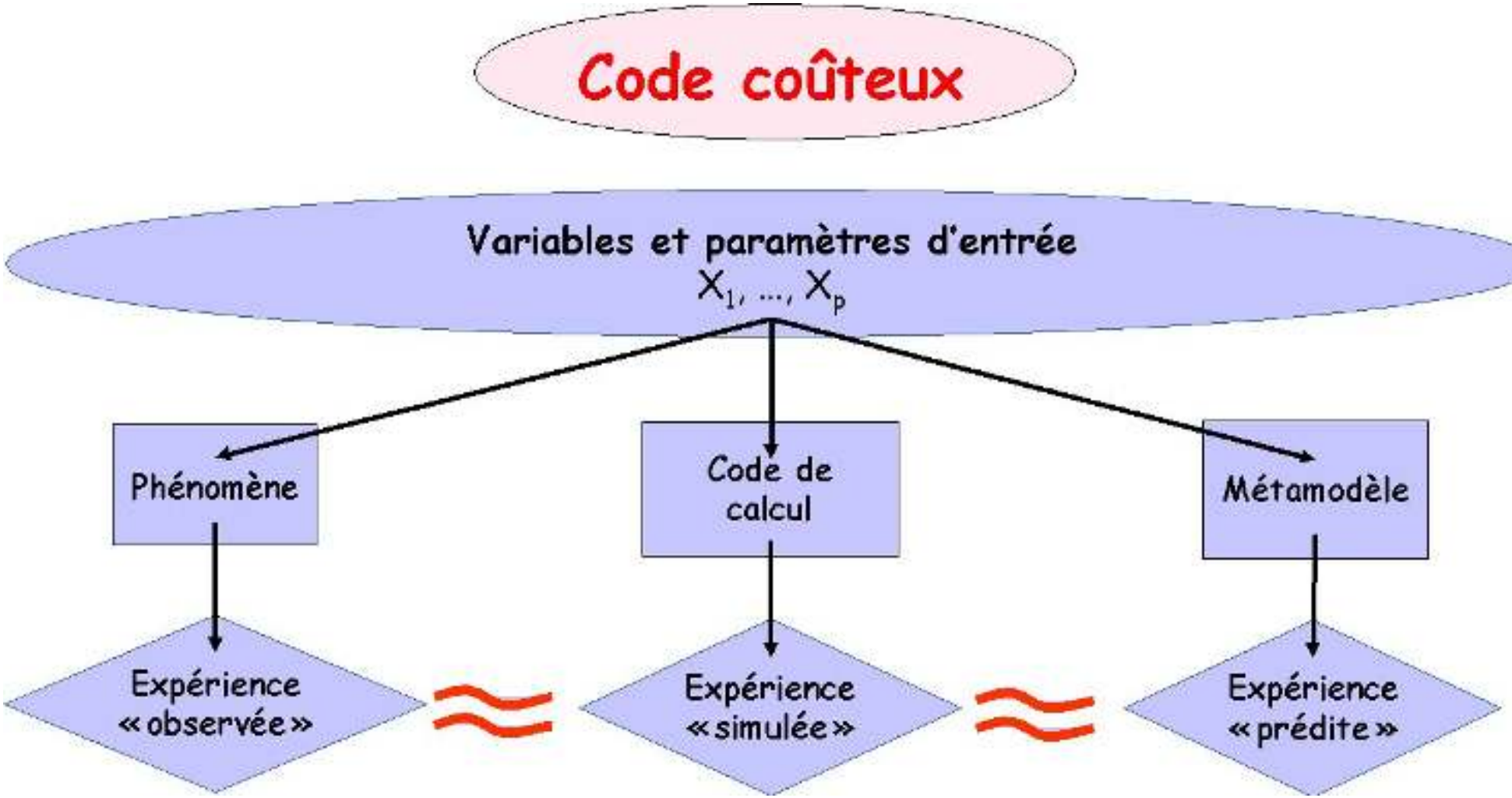


FIG.: Niveaux d'approximation d'un phénomène.

$\rightarrow$ Beaucoup de résultats de code nécessaires $\Rightarrow$ métamodèle rapide.

Résultats attendus, étapes suivies

N couples (x_i, y_i) connus :

- Entrées $x_i \in \mathbb{R}^p$ = état initial du système physique ;
- Sorties $y_i \in \mathcal{C}([a, b], \mathbb{R})$ = évolution des paramètres.

Objectif : prédiction de données fonctionnelles via un métamodèle :

$$y^{\text{new}} \simeq \varphi(x^{\text{new}}) \, .$$

Résultats attendus, étapes suivies

N couples (x_i, y_i) connus :

- Entrées $x_i \in \mathbb{R}^p$ = état initial du système physique ;
- Sorties $y_i \in \mathcal{C}([a, b], \mathbb{R})$ = évolution des paramètres.

Objectif : prédiction de données fonctionnelles via un métamodèle :

$$y^{\text{new}} \simeq \varphi(x^{\text{new}}) \, .$$

Hypothèse

Les sorties sont probablement divisées en k groupes.

$\Rightarrow$ Il faut retrouver ces groupes.

Résultats attendus, étapes suivies

N couples (x_i, y_i) connus :

- Entrées $x_i \in \mathbb{R}^p$ = état initial du système physique ;
- Sorties $y_i \in \mathcal{C}([a, b], \mathbb{R})$ = évolution des paramètres.

Objectif : prédiction de données fonctionnelles via un métamodèle :

$$y^{\text{new}} \simeq \varphi(x^{\text{new}}) \, .$$

Hypothèse

Les sorties sont probablement divisées en k groupes.

$\Rightarrow$ Il faut retrouver ces groupes.

Cas "facile" : $y_i \in \mathbb{R}^d$

$\Rightarrow$ Représenter une fonction avec d réels

Puis apprentissage statistique classique

Résultats attendus, étapes suivies

N couples (x_i, y_i) connus :

- Entrées $x_i \in \mathbb{R}^p$ = état initial du système physique ;
- Sorties $y_i \in \mathcal{C}([a,b], \mathbb{R})$ = évolution des paramètres.

Objectif : prédiction de données fonctionnelles via un métamodèle :

$$y^{\text{new}} \simeq \varphi(x^{\text{new}}) \,.$$

Hypothèse

Les sorties sont probablement divisées en k groupes.

$\Rightarrow$ Il faut retrouver ces groupes.

Cas "facile" : $y_i \in \mathbb{R}^d$

$\Rightarrow$ Représenter une fonction avec d réels

Puis apprentissage statistique classique ..et *reconstruction*.

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Exemple : 100 transitoires de température

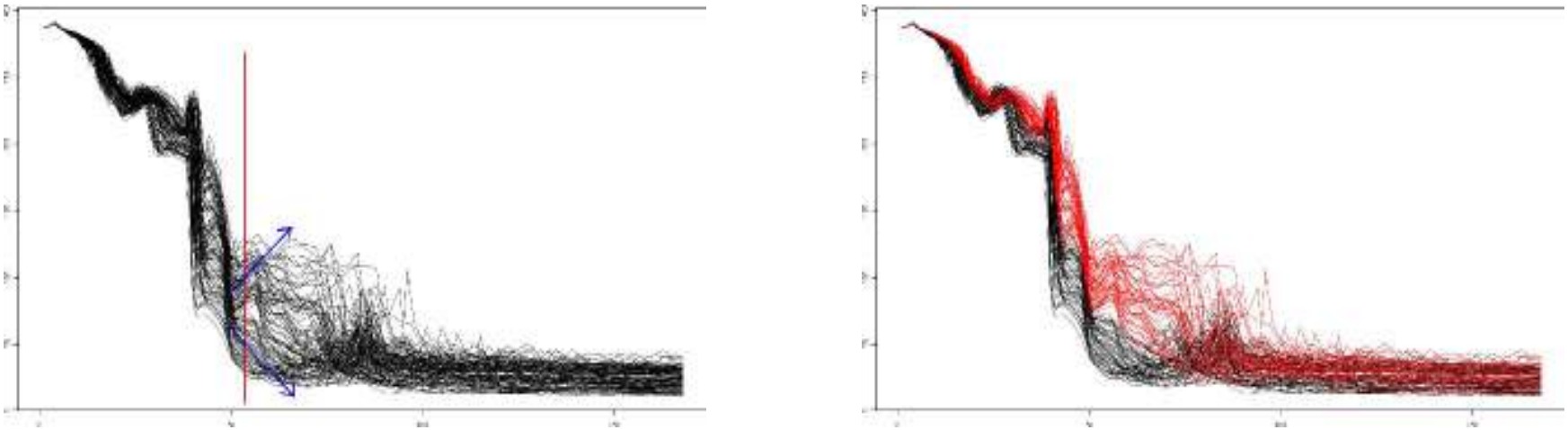


FIG.: Deux groupes de courbes ?

Exemple : 100 transitoires de température

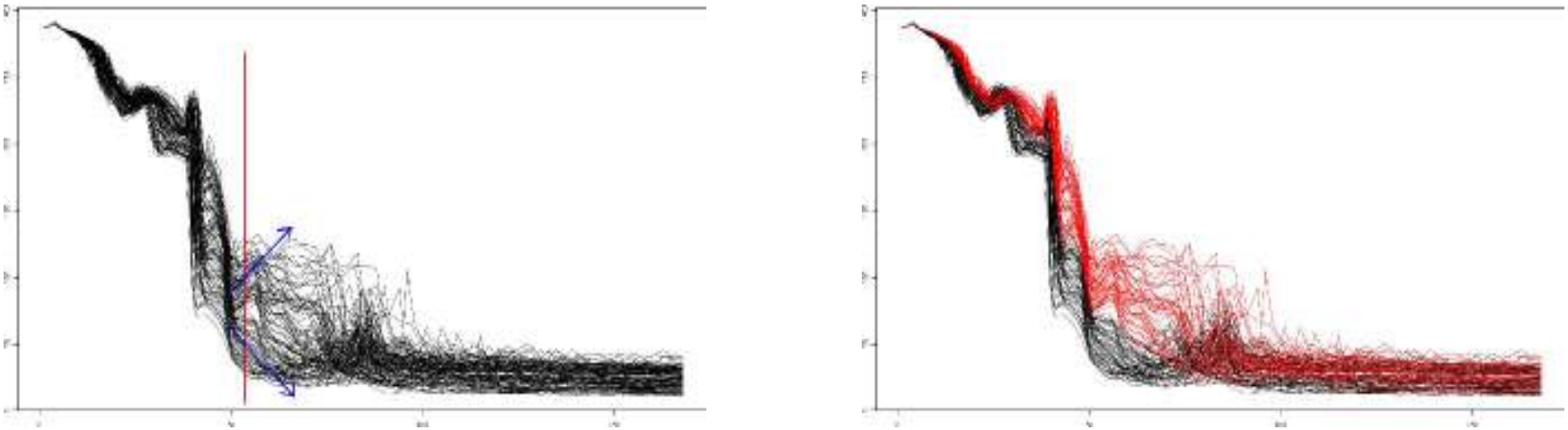


FIG.: Deux groupes de courbes ?

$\longrightarrow$ Regroupement des courbes aux caractéristiques similaires :

- différents types de comportements physiques ;
- meilleure modélisation dans chaque cluster.

Précautions à prendre

- Pas de clusters trop petits.

Précautions à prendre

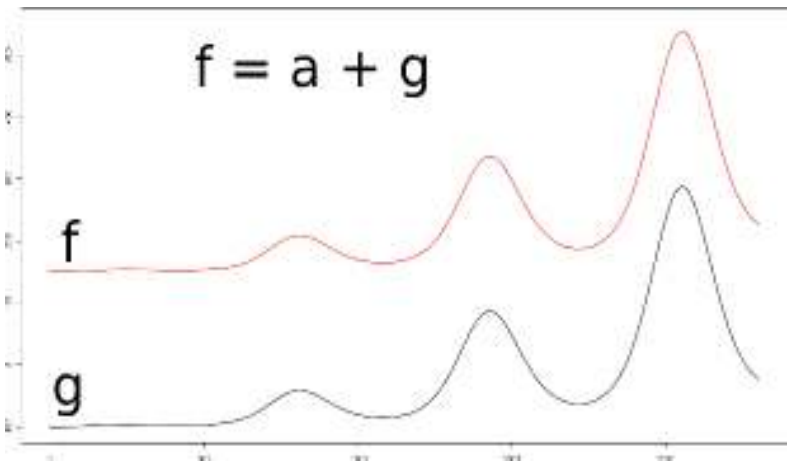
- Pas de clusters trop petits.
- Clusters sur les entrées x_i ? Nombre de clusters ?

  Possibilité : validation croisée ...

Précautions à prendre

- Pas de clusters trop petits.
- Clusters sur les entrées x_i ? Nombre de clusters ?

  Possibilité : validation croisée ...

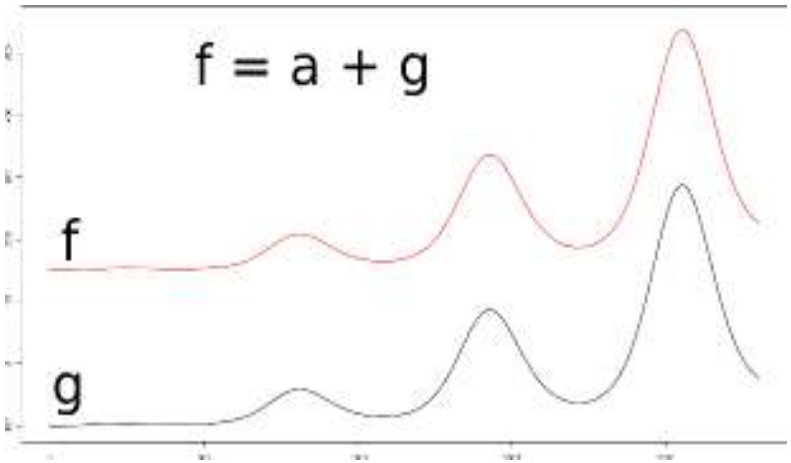


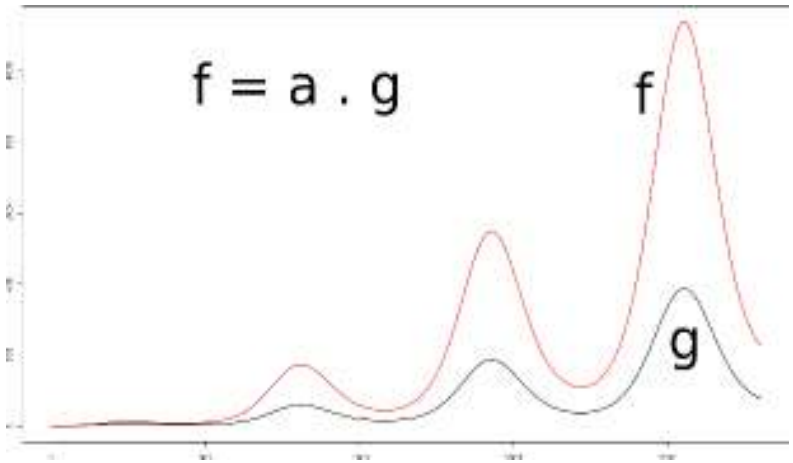
- Type de distance / similarité ?
  - distances L^2 : pas d'information sur les similarités de forme ;

Précautions à prendre

- Pas de clusters trop petits.
- Clusters sur les entrées x_i ? Nombre de clusters ?

  Possibilité : validation croisée ...



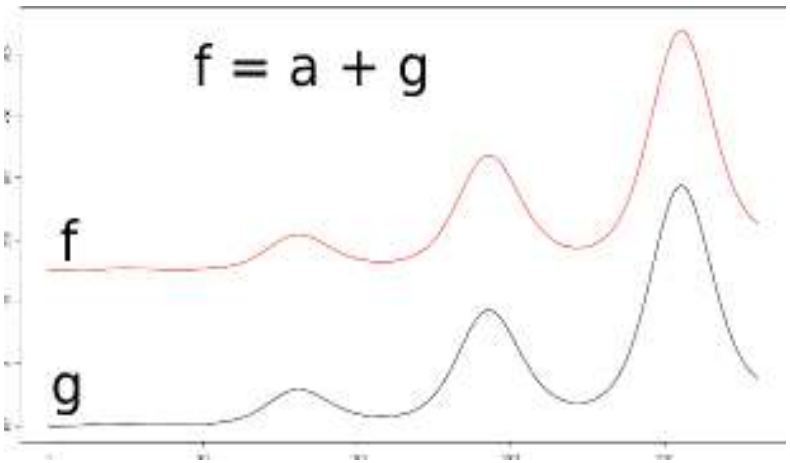


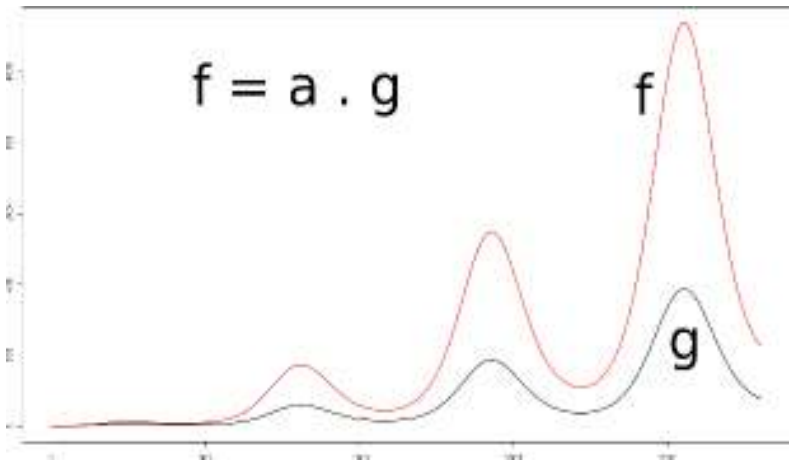
- Type de distance / similarité ?
  - distances L^2 : pas d'information sur les similarités de forme ;
  - semi-distance $d(f,g) = \int_a^b |f'(t) - g'(t)|dt$;

Précautions à prendre

- Pas de clusters trop petits.
- Clusters sur les entrées x_i ? Nombre de clusters ?

  Possibilité : validation croisée ...



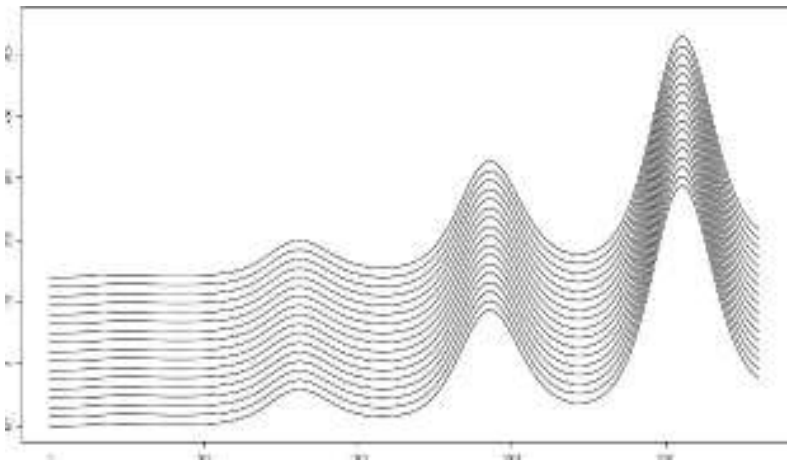


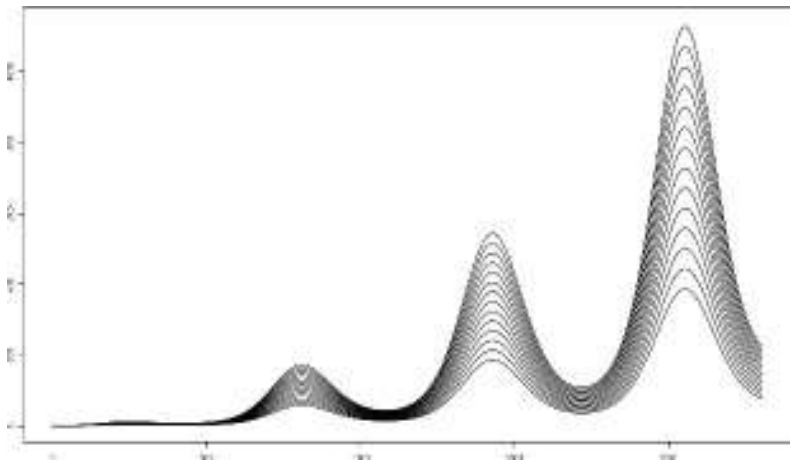
- Type de distance / similarité ?
  - distances L^2 : pas d'information sur les similarités de forme ;
  - semi-distance $d(f,g) = \int_a^b |f'(t) - g'(t)|dt$;
  - semi-distance $d(f,g) = \min_{\alpha,\beta\in\mathbb{R}} \|(\alpha f + \beta\mathbb{1}) + g\|$.

Précautions à prendre

- Pas de clusters trop petits.
- Clusters sur les entrées x_i ? Nombre de clusters ?

  Possibilité : validation croisée ...





- Type de distance / similarité ?
  - distance L^2 :

    pas d'information sur les similarités de forme, *mais* ...

Graphe de voisinage

Pourquoi ne pas utiliser la distance euclidienne ?

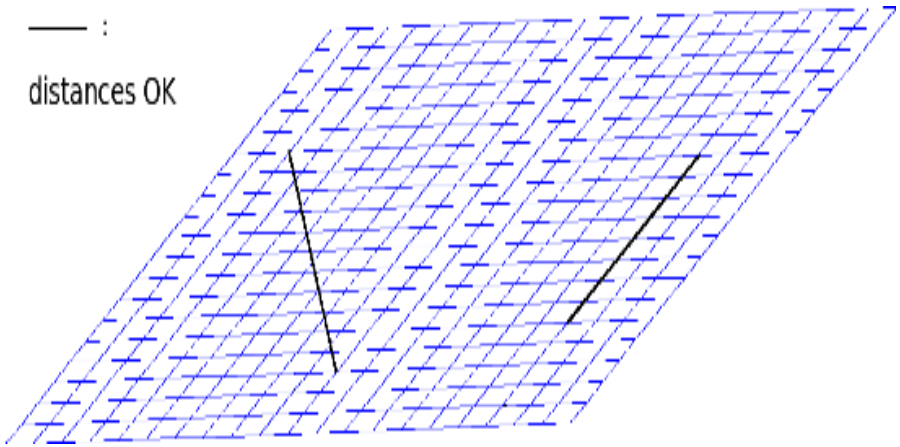


FIG.: Sous-espace linéaire

Graphe de voisinage

Pourquoi ne pas utiliser la distance euclidienne ?

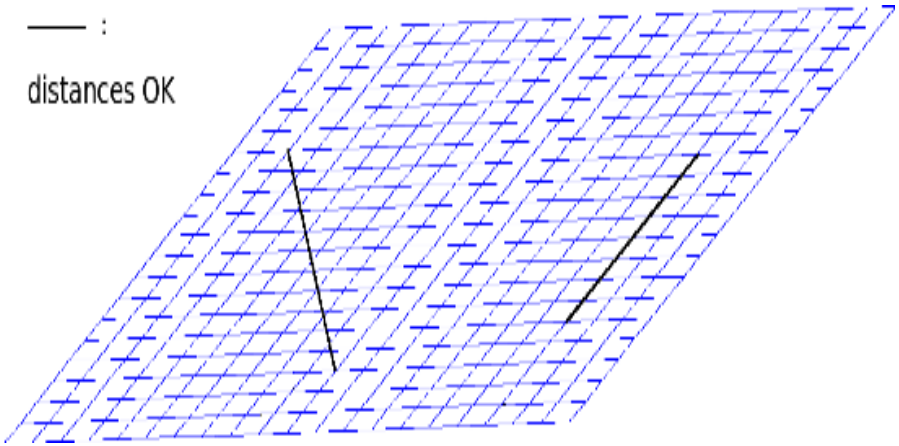


FIG.: Sous-espace linéaire

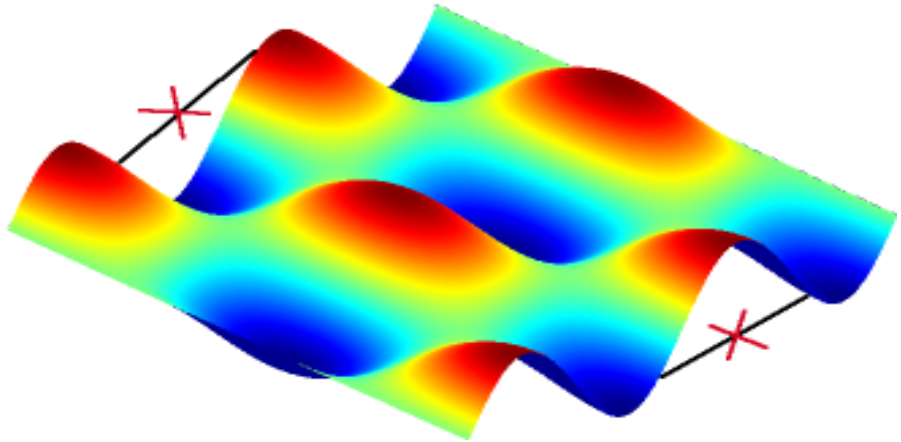


FIG.: Surface plus compliquée

$\longrightarrow$ Prise en compte des déformations de la surface.

Graphe de voisinage

Pourquoi ne pas utiliser la distance euclidienne ?

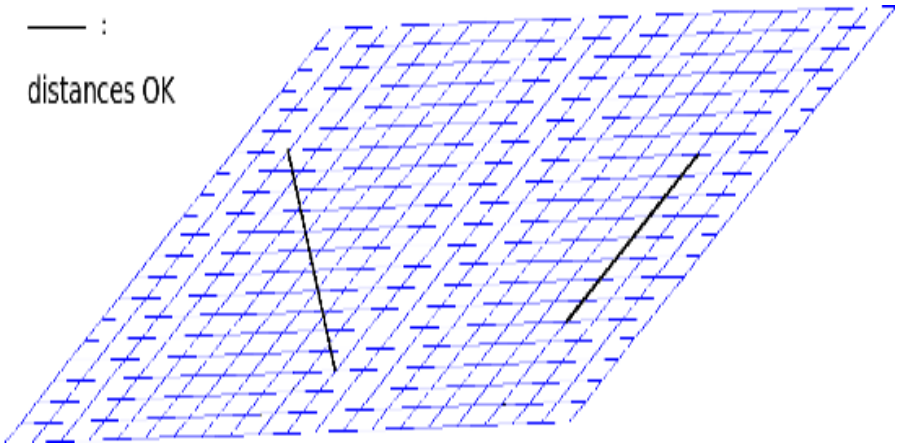


FIG.: Sous-espace linéaire

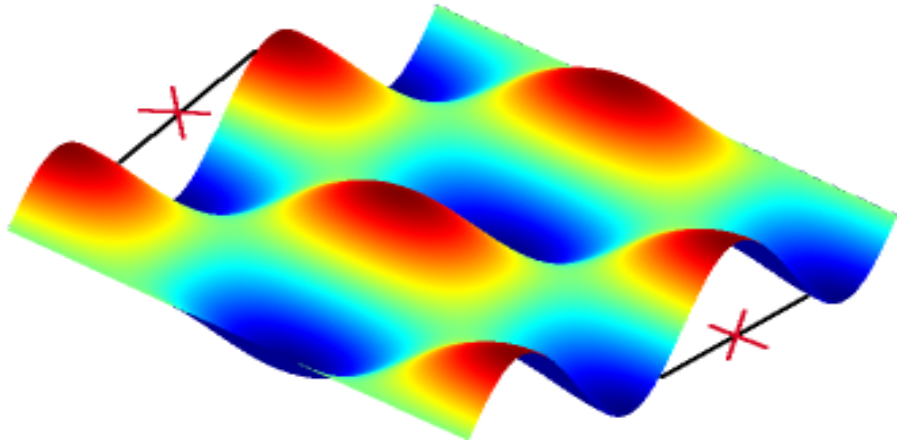
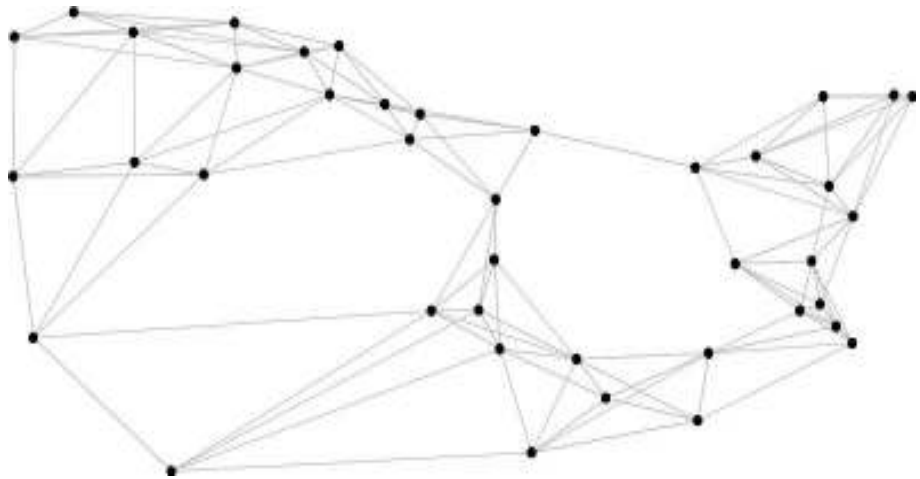


FIG.: Surface plus compliquée

$\longrightarrow$ Prise en compte des déformations de la surface.

Approximation : plus courts chemins dans un graphe.

Exemple de graphe des k plus proches voisins :



Exemple : fleuve

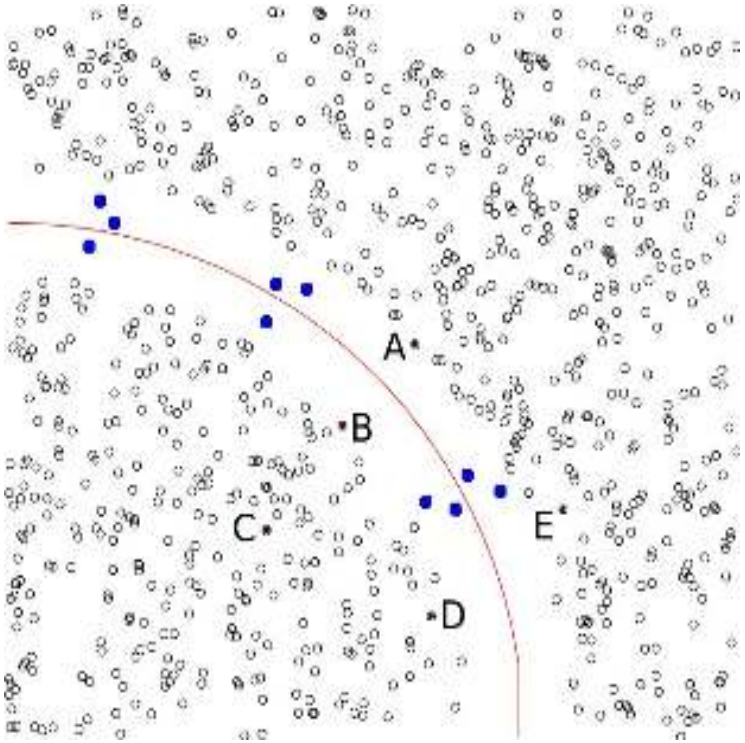


FIG.: Zones d'habitation séparées par un cours d'eau.

Distance géodésique : $|AB| > |BC|$ OK, mais $|DC| \simeq |DE|$: faux.

Comment exprimer à la fois $|AB| > |BC|$ et $|DC| < |DE|$?

Parcours sur le graphe

"Il y a beaucoup de courts chemins entre A et B"
$=$ "Une marche aléatoire issue de A reviendra vite vers A".

Parcours sur le graphe

"Il y a beaucoup de courts chemins entre A et B"
$=$ "Une marche aléatoire issue de A reviendra vite vers A".

Marche aléatoire dans le graphe de voisinage

Transition de y_i vers y_j avec probabilité

$$\mathbb{P}(i \to j) = \begin{cases} \alpha e^{-\frac{\|y_i - y_j\|^2}{\sigma_i^2}} & \text{si } y_j \text{ voisin de } y_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

σ_i : paramètre local dépendant de k et ...

Expression de la distance CT

Principal résultat (M. Saerens et al., 2004 [5])

Temps moyen d'aller-retour entre A et B

$=$

carré de la distance euclidienne entre A et B
dans un espace de représentation à N dimensions.

Expression de la distance CT

Principal résultat (M. Saerens et al., 2004 [5])

Temps moyen d'aller-retour entre A et B

=

carré de la distance euclidienne entre A et B
dans un espace de représentation à N dimensions.

Calcul facile :

- P = matrice de transition, $P_{ij} = \mathbb{P}(i \longrightarrow j)$;
- L laplacien du graphe : $L = I - P$.

$$d^2_{CT}(y_i, y_j) \propto L^+_{ii} + L^+_{jj} - 2L^+_{ij} \,,$$

avec L^+ pseudo-inverse de L.

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Clustering "CT-hiérarchique"

Algorithme déjà conçu pour une matrice de distances.

Principe : partant de N clusters, les fusionner petit à petit en fonction des distances relatives.

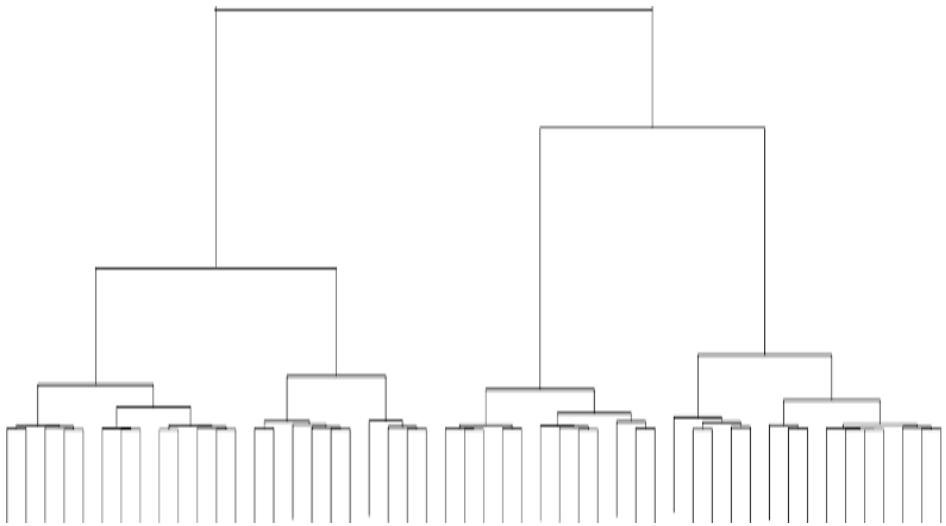


FIG.: Dendogramme résultat d'un clustering hiérarchique.

Clustering "CT-hiérarchique"

Algorithme déjà conçu pour une matrice de distances.

Principe : partant de N clusters, les fusionner petit à petit en fonction des distances relatives.

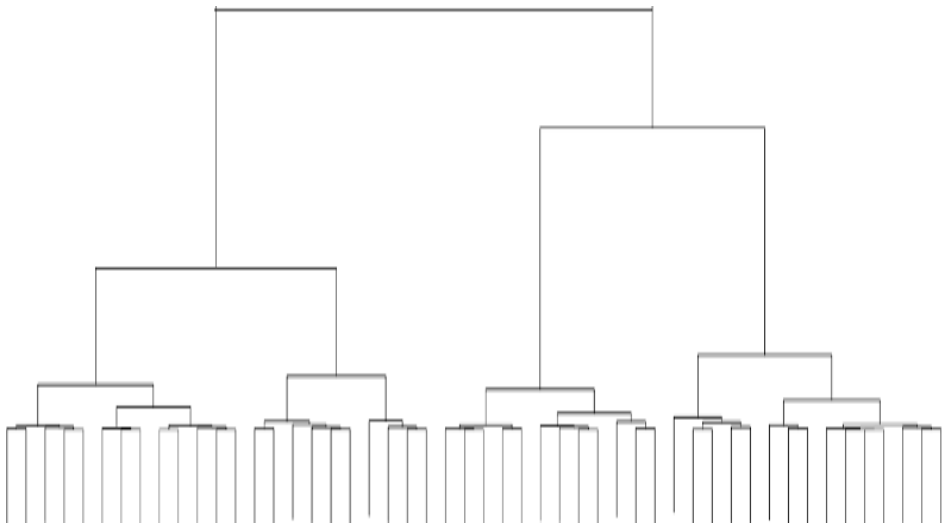


FIG.: Dendogramme résultat d'un clustering hiérarchique.

Sortie : suite de partitions emboîtées

$$(A_i)_{i=1..N} \text{ avec } A_{i+1} \prec A_i \text{ ; } A_k \text{ contient } k \text{ groupes.}$$

Exemples

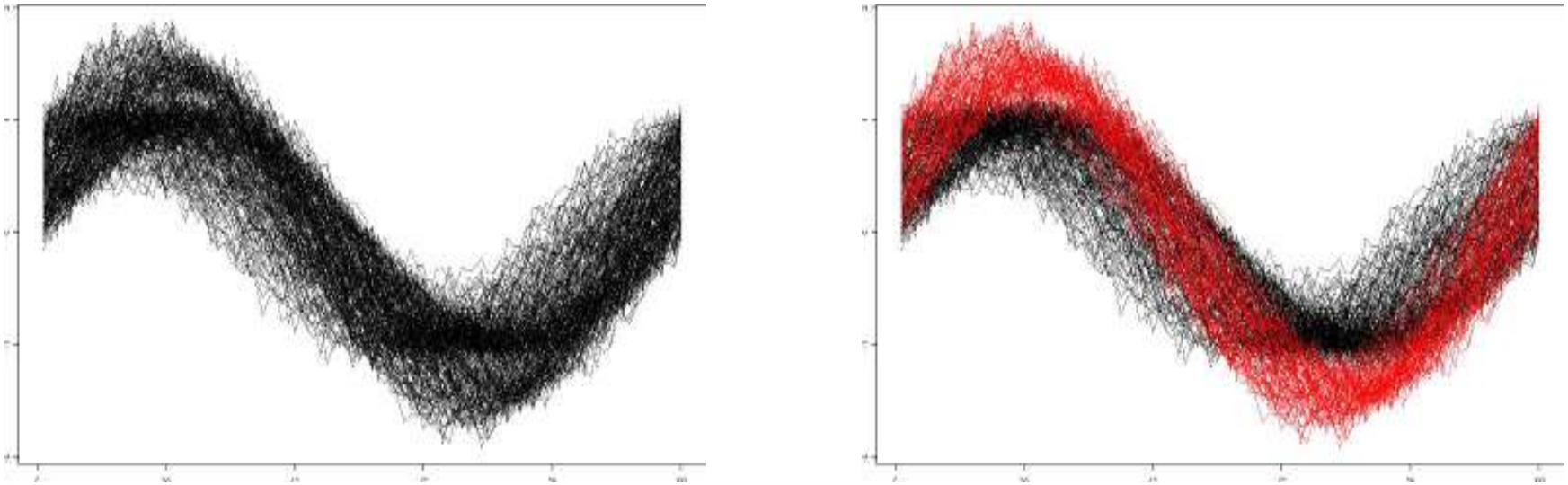


FIG.: 2 clusters, $x \mapsto \alpha \cos x + \beta \sin x$ avec $(\alpha, \beta) \in \mathcal{S}(0, 1-2)$

Exemples

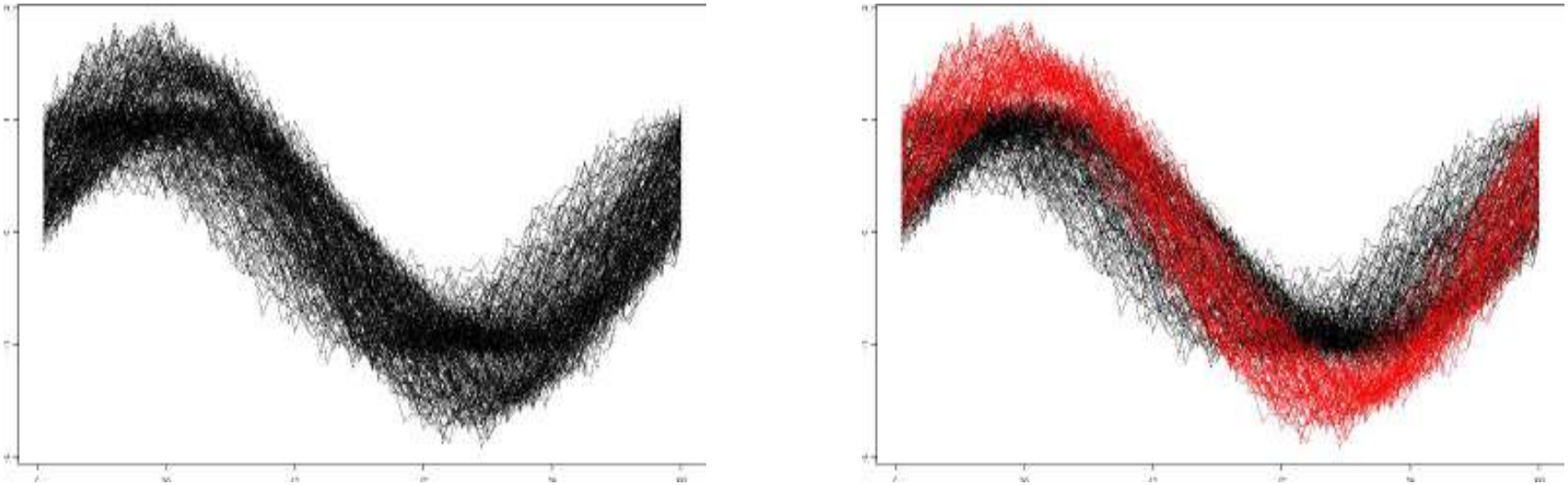


FIG.: 2 clusters, $x \mapsto \alpha \cos x + \beta \sin x$ avec $(\alpha, \beta) \in \mathcal{S}(0, 1-2)$

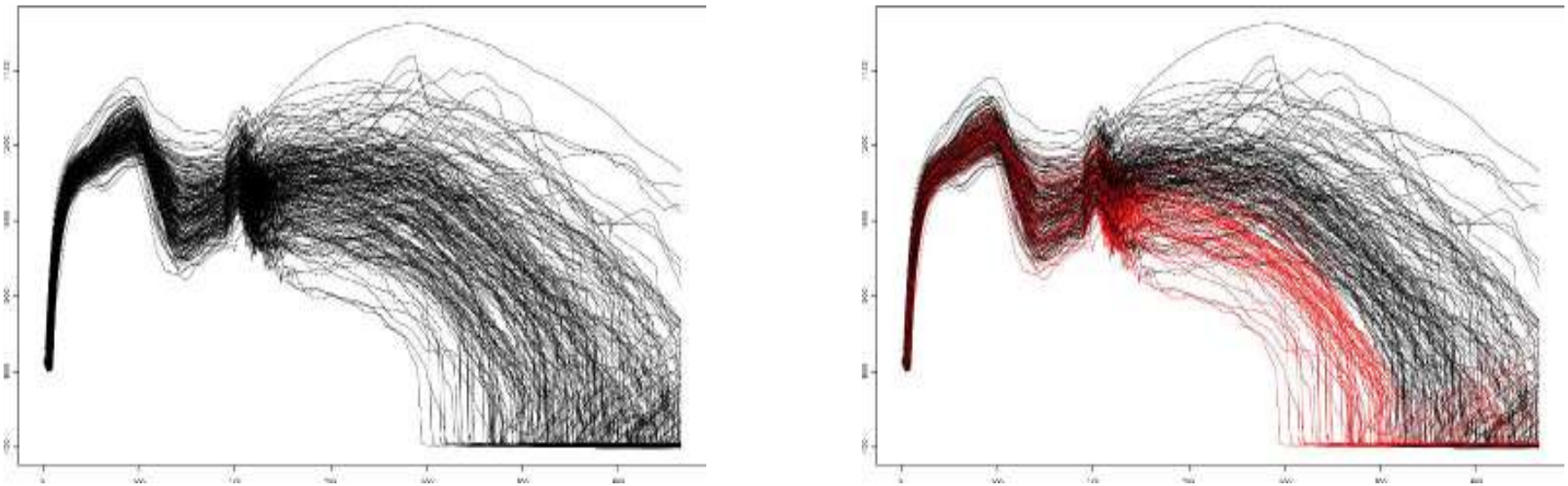


FIG.: 200 sorties du code cathare séparées en 2 groupes

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Illustration

Données "non linéaires", structurées en une variété (au moins) $\mathcal{C}^0$.

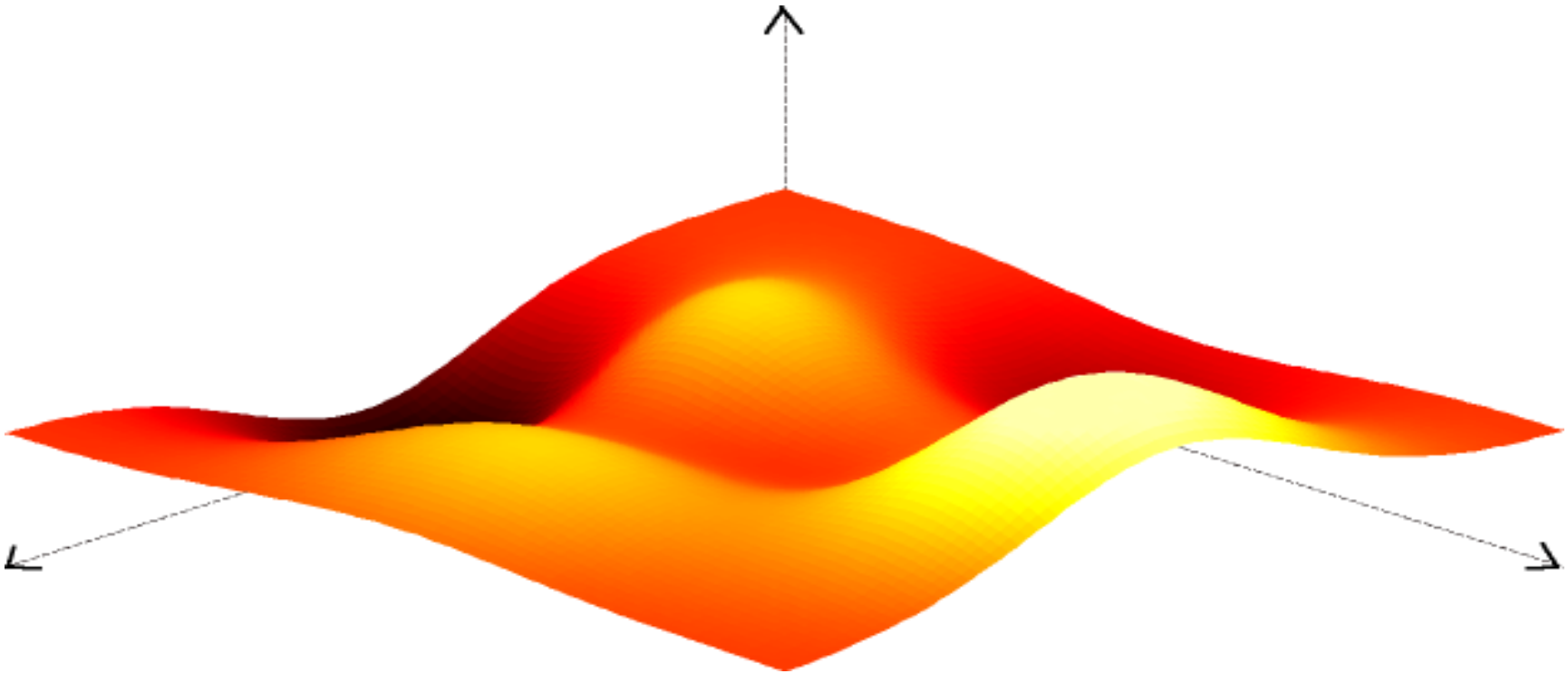


FIG.: Surface de dimension deux dans $\mathbb{R}^3$.

But : trouver un système de coordonnées le plus réduit possible pour décrire efficacement les données.

Vers une représentation "optimale"

Il faut paramétrer l'ensemble des sorties du code $\mathcal{Y} \subset \mathcal{C}([a,b],\mathbb{R})$:

$r(y \in \mathcal{Y}) = z \in \mathbb{R}^d$, avec d le plus petit possible.

N échantillons $y_i \Rightarrow N$ vecteurs $z_i = r(y_i)$ à déterminer.

Vers une représentation "optimale"

Il faut paramétrer l'ensemble des sorties du code $\mathcal{Y} \subset \mathcal{C}([a,b],\mathbb{R})$:

$r(y \in \mathcal{Y}) = z \in \mathbb{R}^d$, avec d le plus petit possible.

N échantillons $y_i \Rightarrow N$ vecteurs $z_i = r(y_i)$ à déterminer.

..sous contraintes :

- conservation des voisinages ;
- conservation des distances.

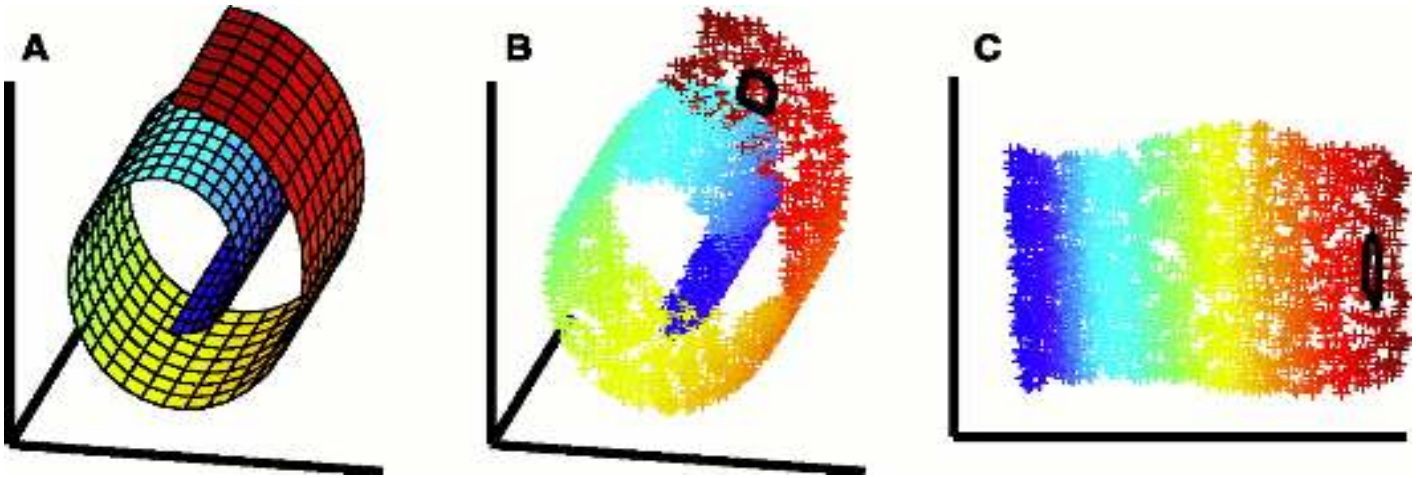


FIG.: carte 2D du jeu de données swissroll

Méthode

Recherche de la vraie dimension $\Rightarrow$ représentation non linéaire, distances euclidiennes $\leftarrow$ distances géodésiques.

1. Estimation de la géométrie locale : graphe de "visibilité".

Point 1 : ▸ voisinages

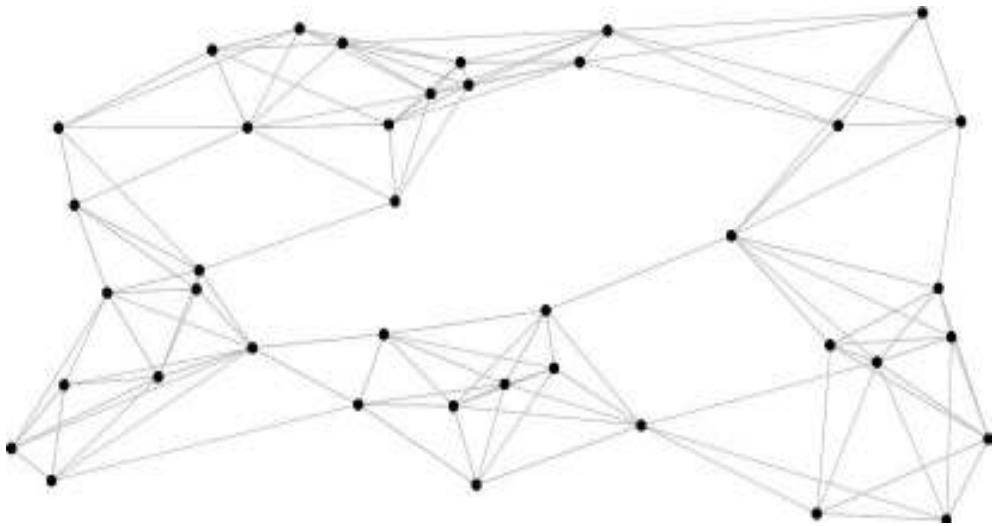


FIG.: Représentation initiale dans un graphe

Méthode

Recherche de la vraie dimension $\Rightarrow$ représentation non linéaire,

distances euclidiennes $\leftarrow$ distances géodésiques.

1. Estimation de la géométrie locale : graphe de "visibilité".
2. Estimation de la dimension : basée sur $\mathbb{P}(Y \in B(y, r)) \propto r^d$.

Point 1 : ▸ voisinages

Point 2 : ▸ dimension

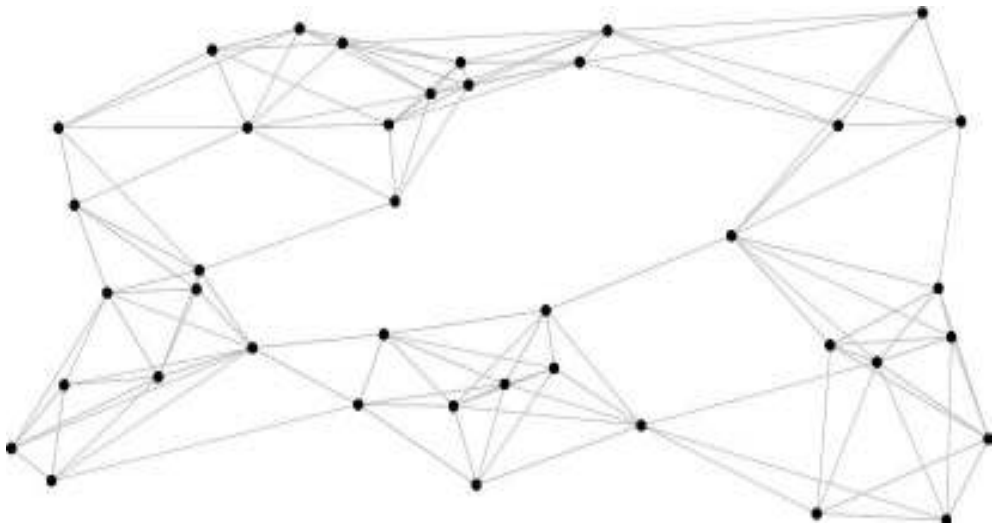


FIG.: Représentation initiale dans un graphe

Méthode

Recherche de la vraie dimension $\Rightarrow$ représentation non linéaire, distances euclidiennes $\leftarrow$ distances géodésiques.

1. Estimation de la géométrie locale : graphe de "visibilité".
2. Estimation de la dimension : basée sur $\mathbb{P}(Y \in B(y, r)) \propto r^d$.
3. *Représentation en coordonnées globales selon les contraintes.*

Point 1 : ▸ voisinages
Point 2 : ▸ dimension

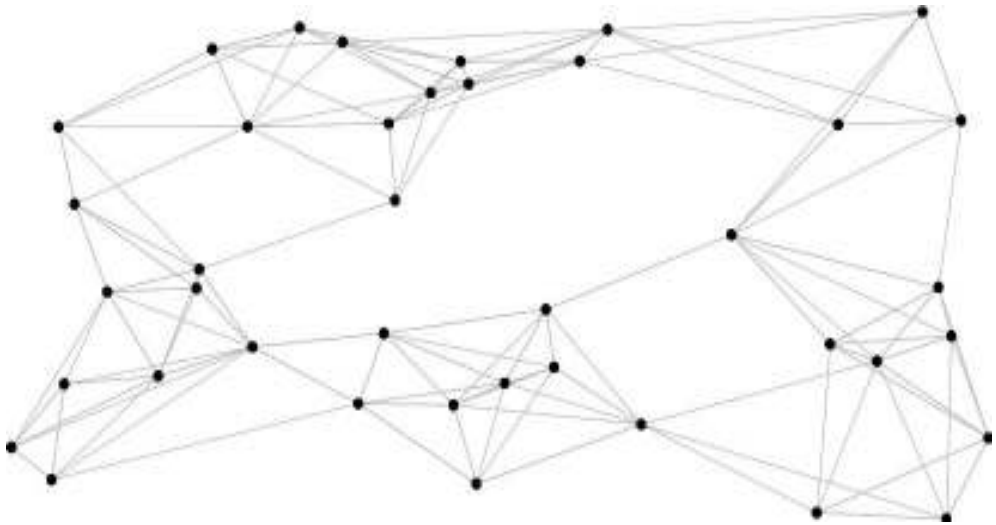


FIG.: Représentation initiale dans un graphe

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Description (T. Lin & H. Zha, 2006)

Tentative de conservation des angles *et* des distances géodésiques.

Premières étapes :

1. choisir une courbe origine y_0 parmi les y_i, (p.ex. la moyenne) ;
2. déterminer une base locale $Q_0 = (e_1, \ldots, e_d)$ de l'espace tangent en y_0 (avec les points du voisinage + SVD) ;

Description (T. Lin & H. Zha, 2006)

Tentative de conservation des angles *et* des distances géodésiques.

Premières étapes :

1. choisir une courbe origine y_0 parmi les y_i, (p.ex. la moyenne) ;
2. déterminer une base locale $Q_0 = (e_1, \ldots, e_d)$ de l'espace tangent en y_0 (avec les points du voisinage + SVD) ;
3. calculer les coordonnées de toutes les courbes "proches" de y_0 en projection sur la base Q_0 ; un voisin y a pour coordonnées

$$z = \arg \min_{z_1,\ldots,z_d} \left\| y - \left(y_0 + \sum_{i=1}^{d} z_i e_i \right) \right\|^2 ,$$

renormalisées pour vérifier $\|y - y_0\| = \|x - x_0\|$.

Coordonnées des non voisins de y_0

Étape 4 : pour y "loin" de y_0, on cherche y_p le prédecesseur de y sur un plus court chemin issu de y_0 (Dijkstra p.ex.). $y_{i_1}, \ldots, y_{i_d}$ sont les voisins déjà traités de y_p (parcours des y_i en largeur).

$\longrightarrow$ On cherche alors z coordonnées de y, telles que les angles $\widehat{yy_py_{i_j}}$ soient $\simeq$ conservés :

$$\cos\theta = \frac{\langle y - y_p, y_{i_j} - y_p \rangle}{\|y - y_p\| \|y_{i_j} - y_p\|} \simeq \frac{\langle z - z_p, z_{i_j} - z_p \rangle}{\|z - z_p\| \|z_{i_j} - z_p\|} = \cos\theta' \,,$$

sous la contrainte $\|y - y_p\| = \|z - z_p\|$.

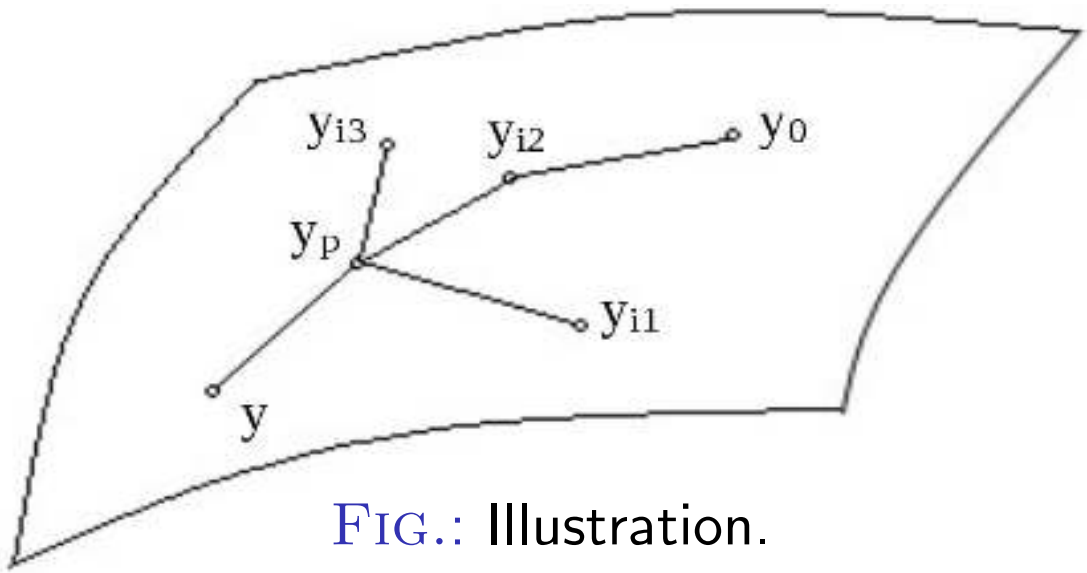


FIG.: Illustration.

Exemples

en pratique

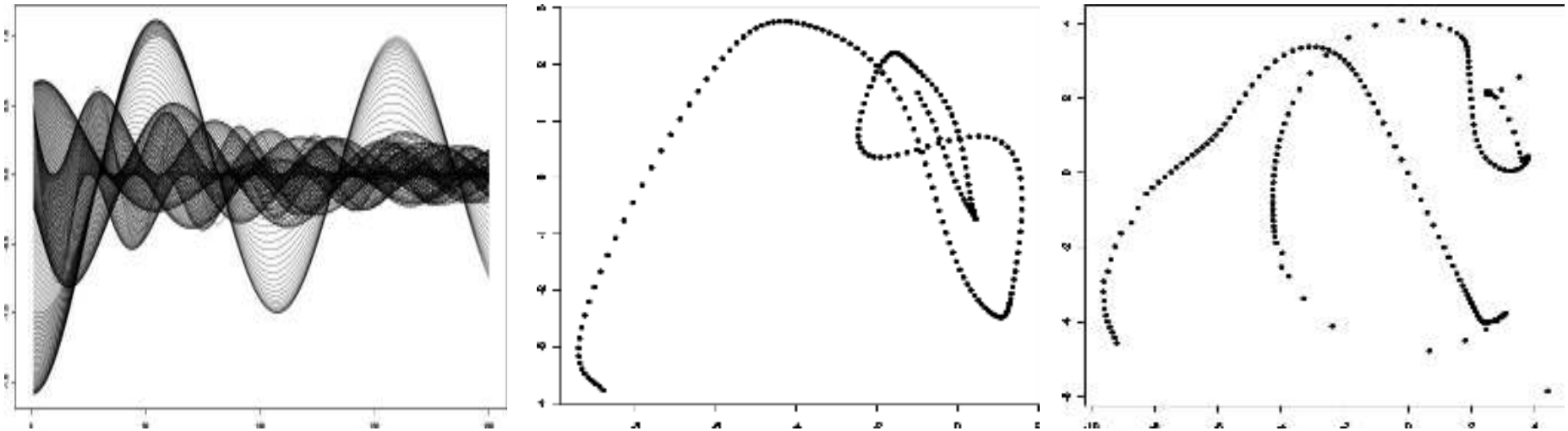


FIG.: Cluster "non linéaire" ; coefficients ACP au centre, RML à droite

Exemples

en pratique

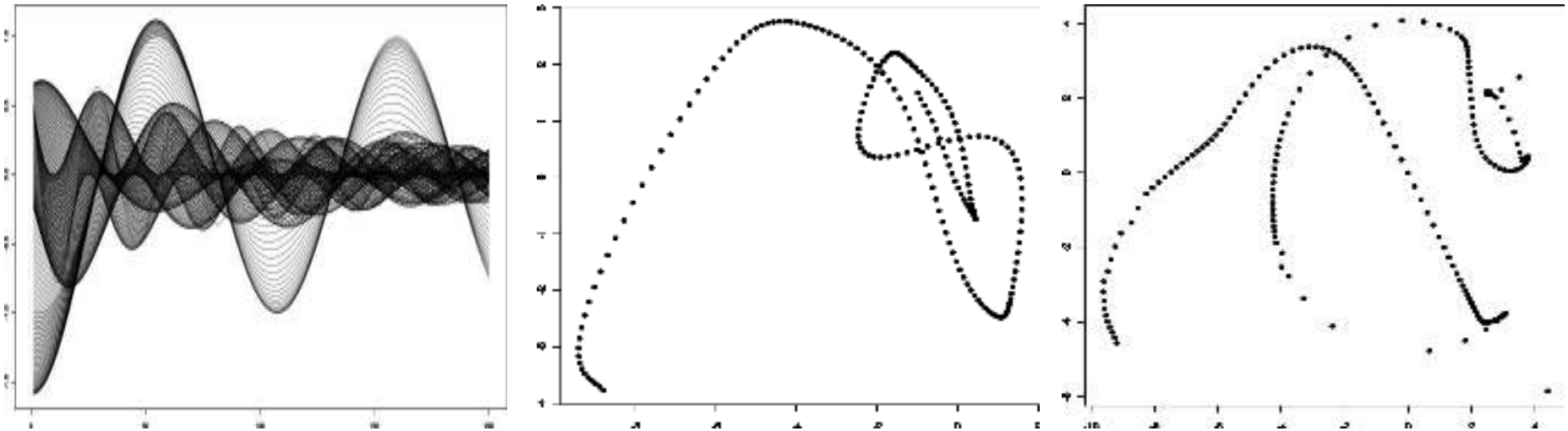


FIG.: Cluster "non linéaire" ; coefficients ACP au centre, RML à droite

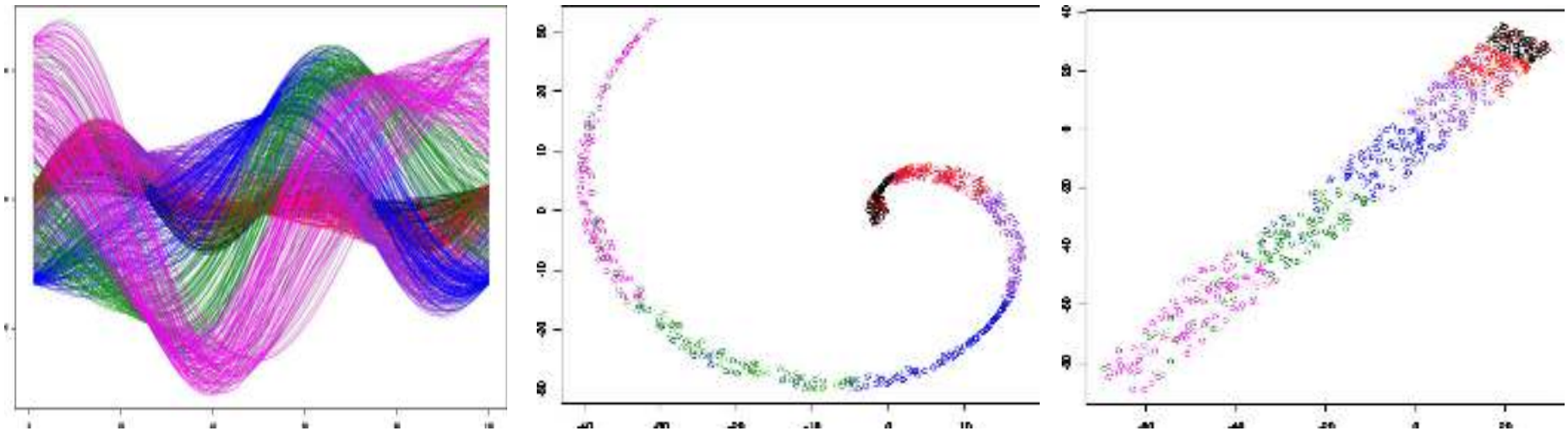


FIG.: g. à d. : $x \mapsto \alpha \cos x + \beta \sin x + \gamma \cos x \sin x$, $(\alpha, \beta, \gamma) \in$ swissroll, coefficients ACP fonctionnelle, puis RML

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Chronologie

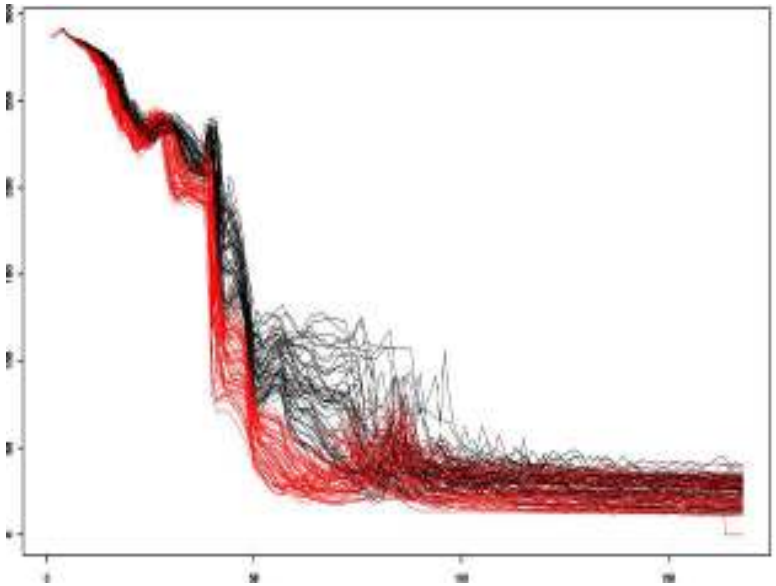


FIG.: 100 transitoires de température en sortie (cathare)

1. Classification non supervisée des N courbes y_i en k clusters C_j

Chronologie

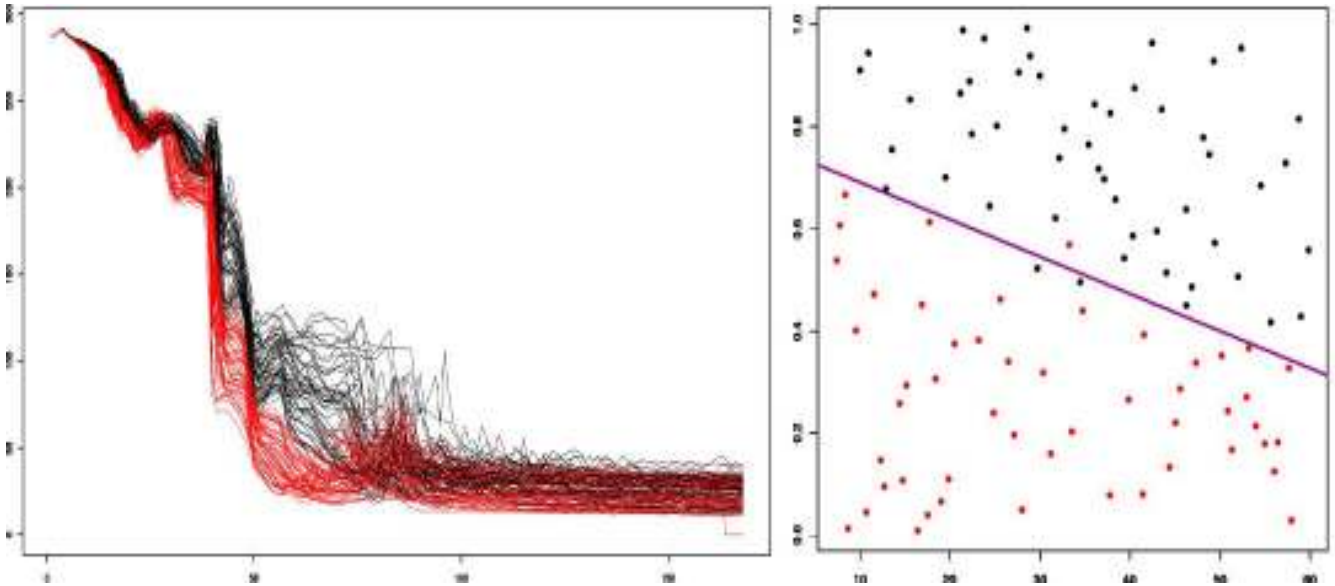


FIG.: g. à d. : sorties fonctionnelles, scatterplot entrées 1 - 4

1. Classification non supervisée des N courbes y_i en k clusters C_j + classification supervisée des entrées x_i.

Chronologie

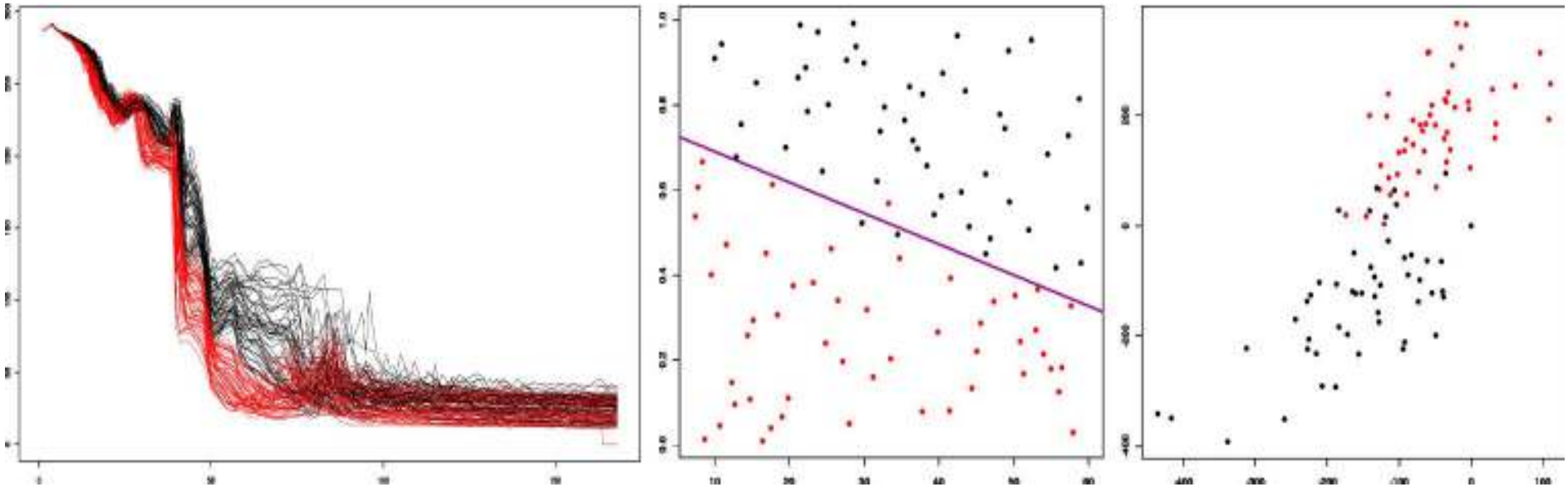


FIG.: g. à d. : sorties fonc., entrées 1 - 4, représentation 2D des sorties

1. Classification non supervisée des N courbes y_i en k clusters C_j
   $+$ classification supervisée des entrées x_i.
2. Pour chaque cluster C_j,
   1. réduction de la dimension : $r(y_i) = z_i$ représente y_i dans $\mathbb{R}^d$;

Chronologie

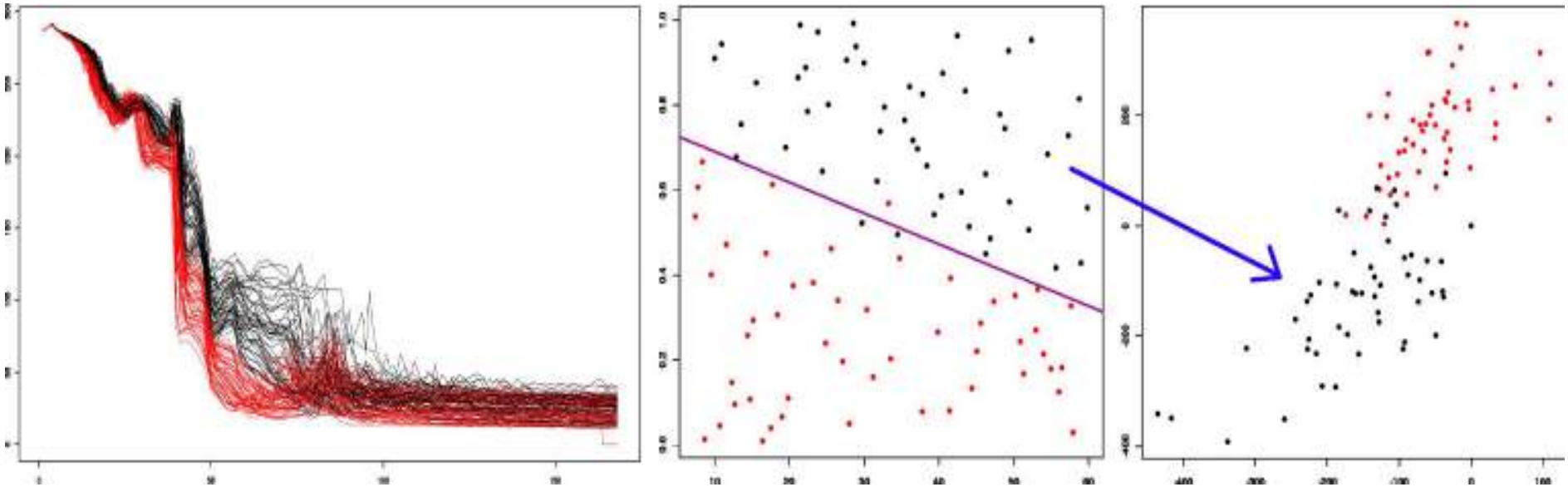


FIG.: g. à d. : sorties fonc., entrées 1 - 4, rep. 2D des sorties

1. Classification non supervisée des N courbes y_i en k clusters C_j
   + classification supervisée des entrées x_i.
2. Pour chaque cluster C_j,
   1. réduction de la dimension : $r(y_i) = z_i$ représente y_i dans $\mathbb{R}^d$;
   2. apprentissage d'une fonction de régression : $f(x_i) \simeq z_i$;

Chronologie

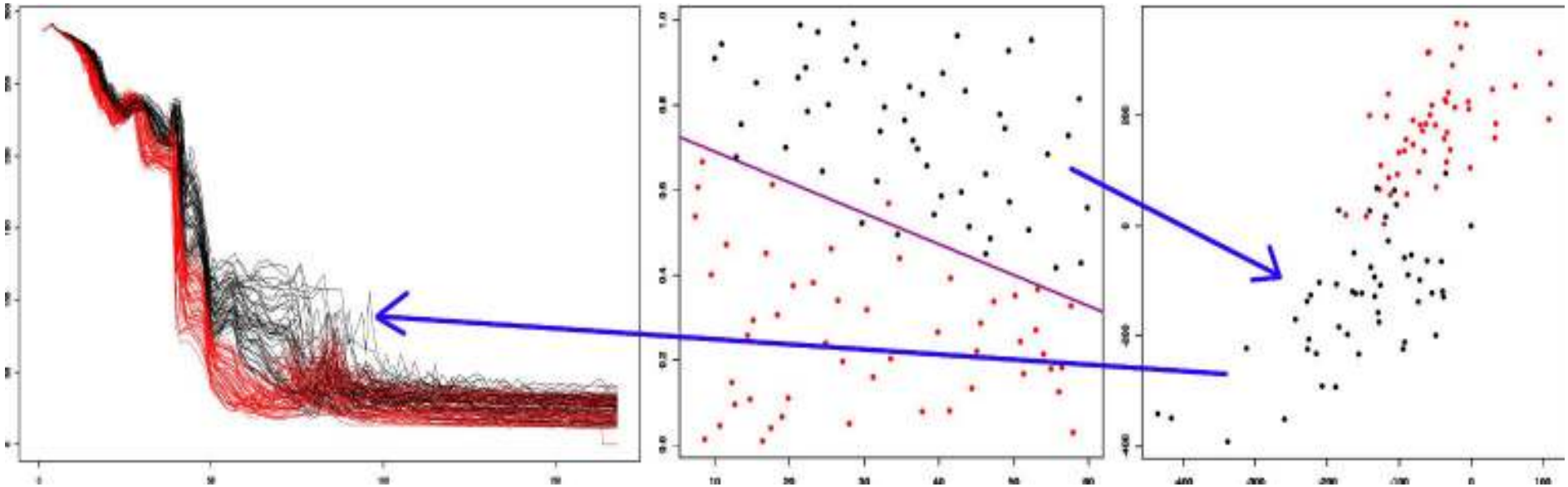


FIG.: g. à d. : sorties fonc., entrées 1 - 4, rep. 2D des sorties

1. Classification non supervisée des N courbes y_i en k clusters C_j
   + classification supervisée des entrées x_i.
2. Pour chaque cluster C_j,
   1. réduction de la dimension : $r(y_i) = z_i$ représente y_i dans $\mathbb{R}^d$;
   2. apprentissage d'une fonction de régression : $f(x_i) \simeq z_i$;
   3. apprentissage d'une fonction de reconstruction : $g(z_i) \simeq y_i$.

Étape de validation

Données :

- courbes d'entraînement : $Y = \{y_i\ ,\ i = 1..n\}$;
- courbes prédites : $\hat{w}_i,\ i = 1..m$;
- "vraies" sorties correspondantes : $w_i,\ i = 1..m$.

Discrétisation $\Rightarrow y_i, \hat{w}_i, w_i \in \mathbb{R}^D$.

Étape de validation

Données :

- courbes d'entraînement : $Y = \{y_i\,,\ i = 1..n\}$;
- courbes prédites : $\hat{w}_i,\ i = 1..m$;
- "vraies" sorties correspondantes : $w_i,\ i = 1..m$.

Discrétisation $\Rightarrow\ y_i, \hat{w}_i, w_i \in \mathbb{R}^D$.

$$MSE[j] = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\hat{w}_i(j) - w_i(j))^2\,, \quad j = 1..D$$

$\longrightarrow$ mesure "absolue" de l'erreur *ponctuelle* commise.

Étape de validation

Données :

- courbes d'entraînement : $Y = \{y_i\,,\ i = 1..n\}$;
- courbes prédites : $\hat{w}_i,\ i = 1..m$;
- "vraies" sorties correspondantes : $w_i,\ i = 1..m$.

Discrétisation $\Rightarrow y_i, \hat{w}_i, w_i \in \mathbb{R}^D$.

$$MSE[j] = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\hat{w}_i(j) - w_i(j))^2\,, \quad j = 1..D$$

$\longrightarrow$ mesure "absolue" de l'erreur *ponctuelle* commise.

$$Q_2[j] = 1 - \frac{m.MSE}{\sum_{i=1}^{m}(\bar{Y}(j) - w_i(j))^2}\,.$$

$\longrightarrow$ mesure relative ponctuelle : comparaison à la moyenne.

Q_2 facilement interprétable.

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Exemple analytique, 3 clusters ("dimension 1")

$$(\alpha_j, \beta_j, \gamma_j) \in \mathbb{R}^3 \mapsto f_{\alpha_j,\beta_j,\gamma_j} : [1,5] \to \mathbb{R}$$
$$x \mapsto \left(\frac{\sin \alpha_j x}{x} + e^{-\beta_j x}\right) \cos \gamma_j x \, ;$$

Paramètres : $\alpha_{1,2,3} = 3\beta_{1,2,3}$, (1, 2, 3 = indices des clusters)

$$\beta_1 \sim \mathcal{U}(1,2),\ \beta_2 \sim \mathcal{U}(0,1),\ \beta_3 \sim \mathcal{U}(0.4,1),$$

$$\gamma_1 = (4-\beta_1^2)^{\frac{1}{2}},\ \gamma_2 = (1-\beta_2^2)^{\frac{1}{2}},\ \gamma_3 = 3(1-\beta_3^2)^{\frac{1}{2}} + 3.$$

$+$ bruit blanc gaussien.

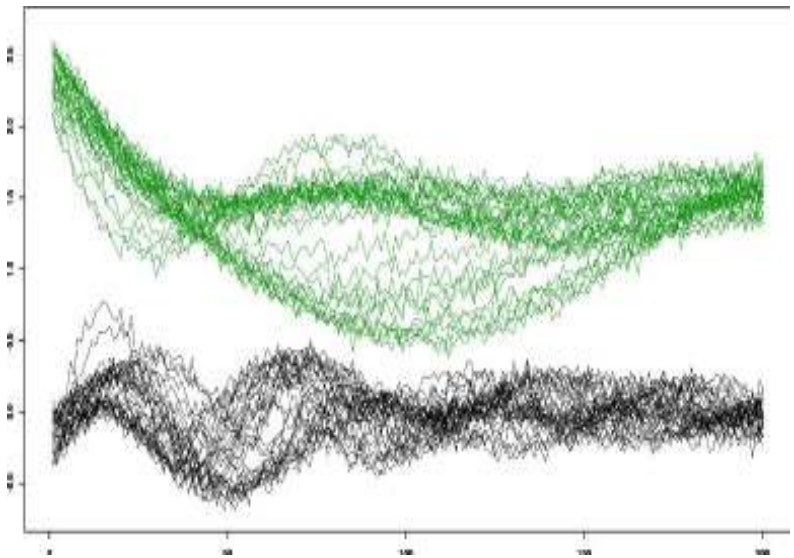


FIG.: 32 courbes des 2 1^{ers} clusters.

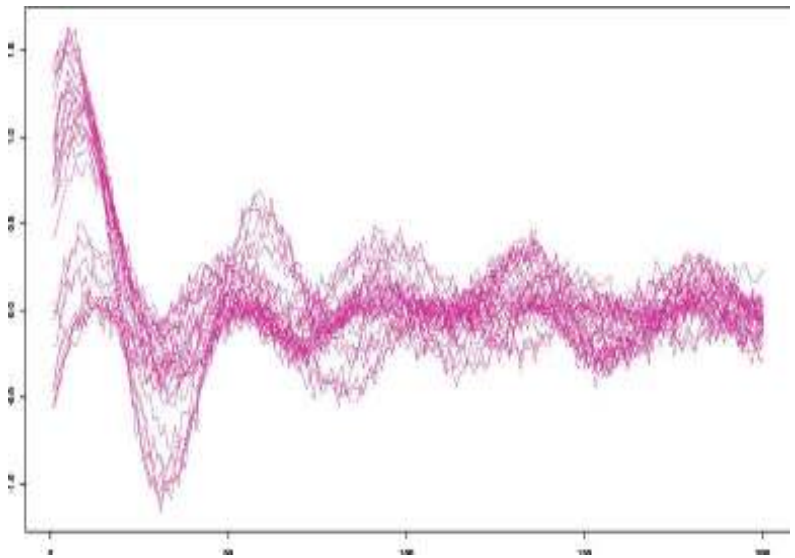


FIG.: 32 courbes du 3^{eme} cluster.

Résultats validation croisée (100-20)

Noir : 150 courbes ; rouge : 300 ; violet : 600.

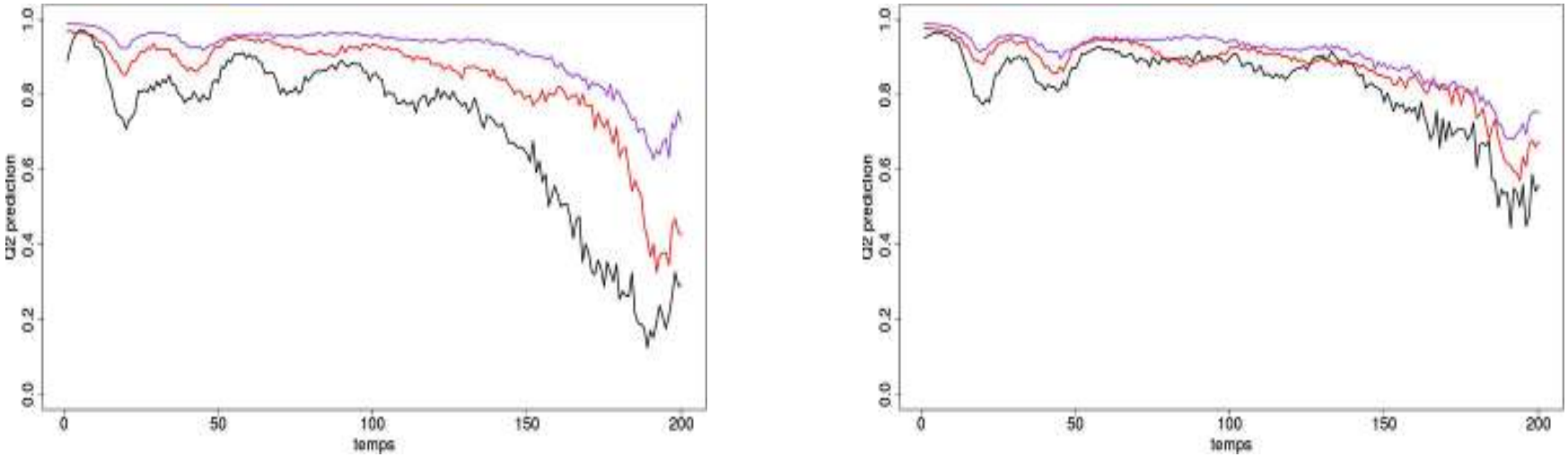


FIG.: Capacité de généralisation ; ACPF à gauche, RML à droite

Résultats validation croisée (100-20)

Noir : 150 courbes ; rouge : 300 ; violet : 600.

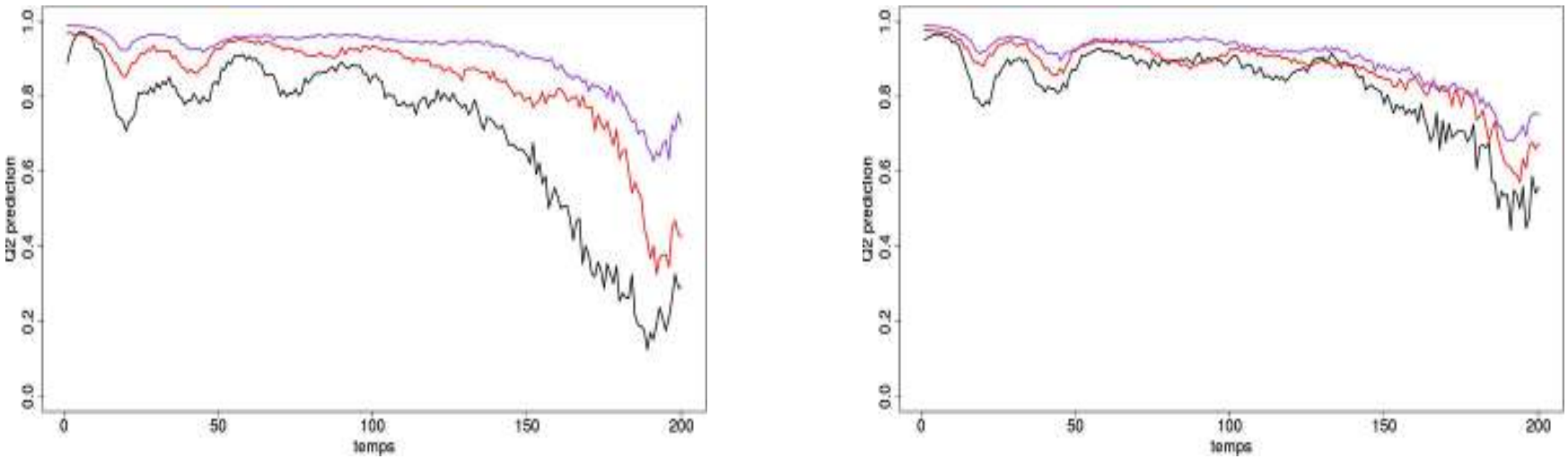


FIG.: Capacité de généralisation ; ACPF à gauche, RML à droite

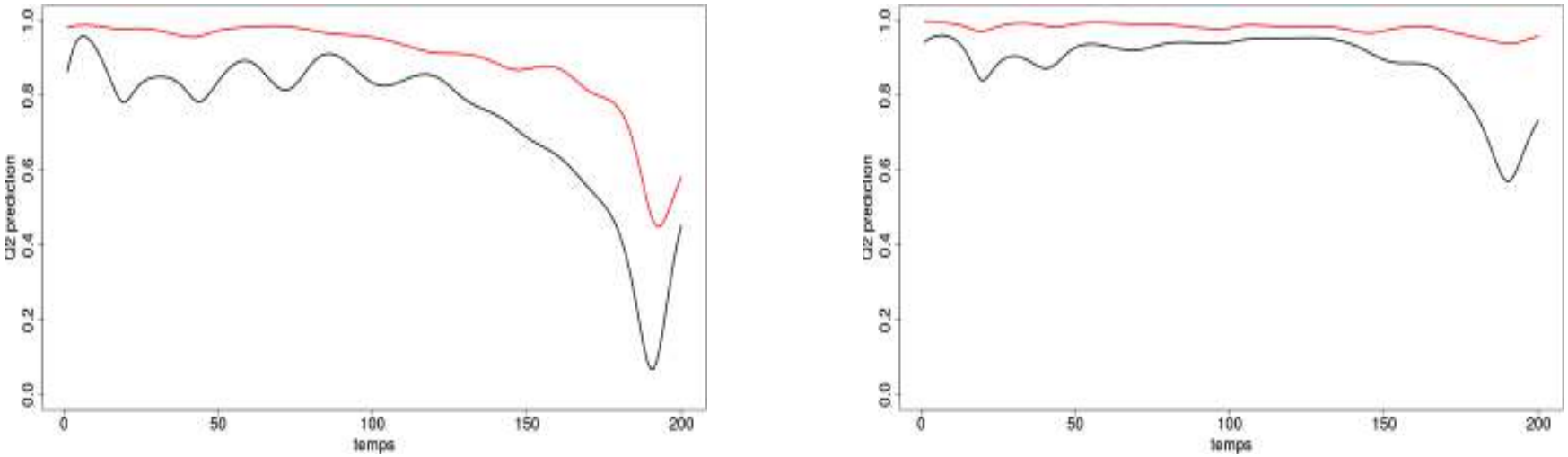


FIG.: ..en supprimant le bruit (ACPF à gauche, RML à droite)

1. Clustering
   - Motivations et difficultés
   - Distance "Commute-Time"
   - Clustering sur une matrice de distances
2. Réduction de la dimension
   - Objectifs
   - Riemaniann Manifold Learning
3. Applications
   - Méthodologie
   - Fonction dont l'expression est connue
   - Jeux de données réels (cathare)

Transitoires de température

100 simulations ;
4 dimensions en entrée,
168 points de discrétisation.

entrées-sorties faciles à diviser
dimension estimée : 4 (!)

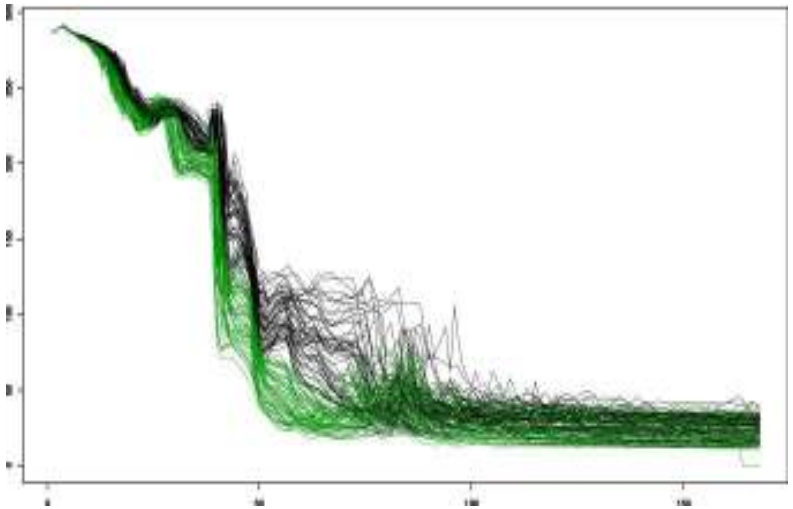


FIG.: Les 100 courbes en sortie

Transitoires de température

100 simulations ;
4 dimensions en entrée,
168 points de discrétisation.

entrées-sorties faciles à diviser
dimension estimée : 4 (!)

noir, rouge : PCA +/- clust. ;
violet, bleu : RML +/- clust.

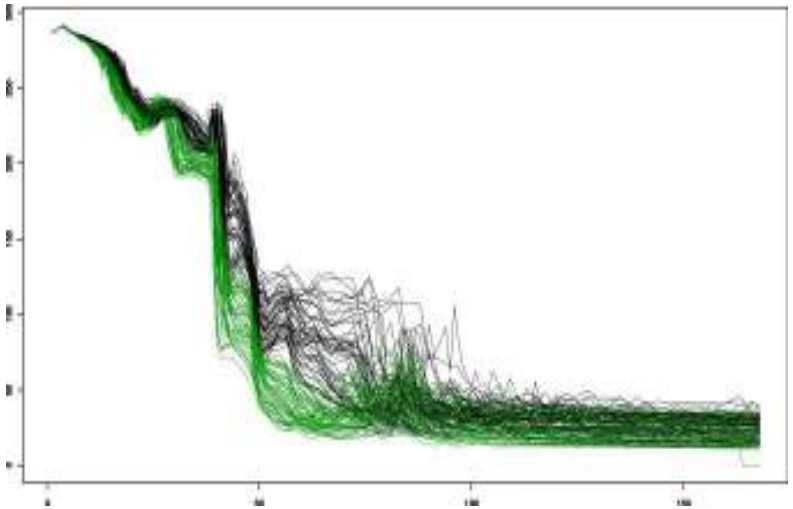


FIG.: Les 100 courbes en sortie

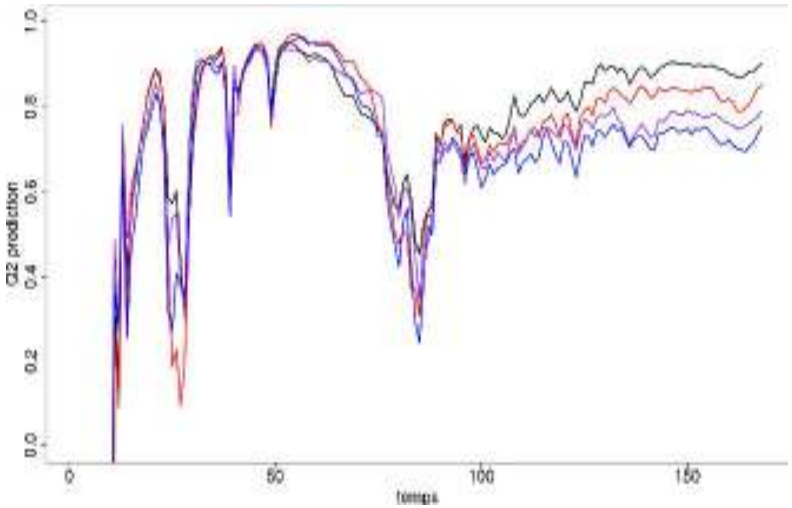


FIG.: $Q2$ de prédiction (100-10)

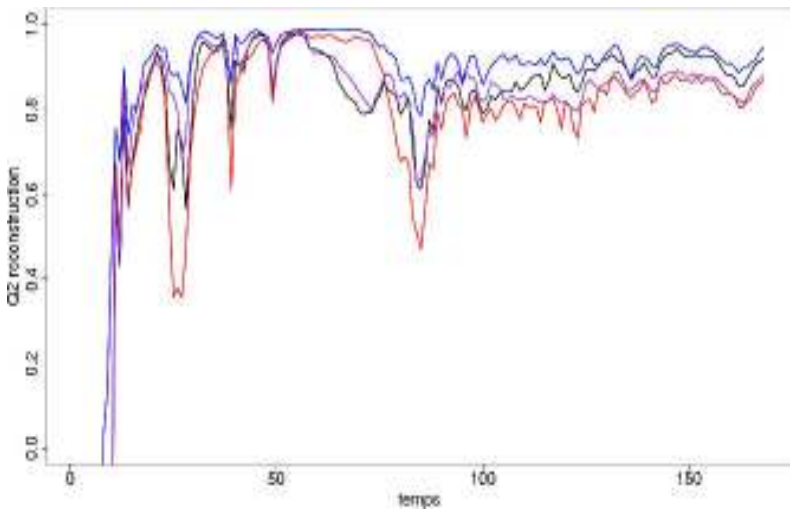
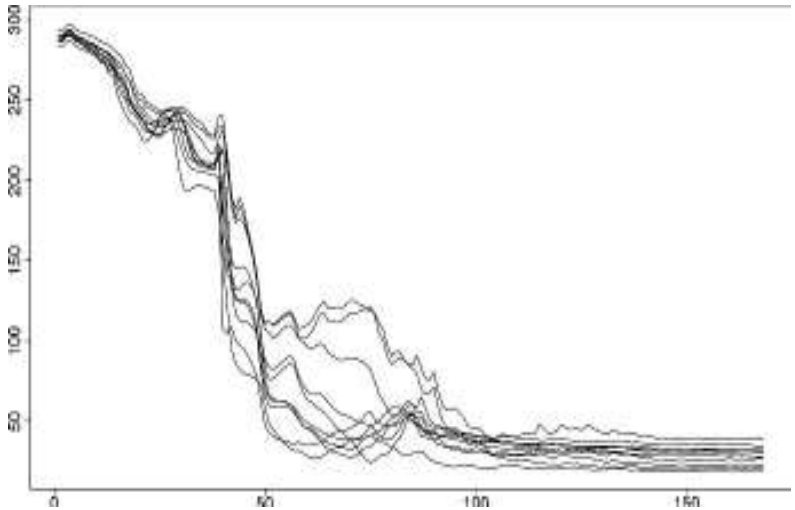


FIG.: $Q2$ de reconstruction

Température : courbes prédites



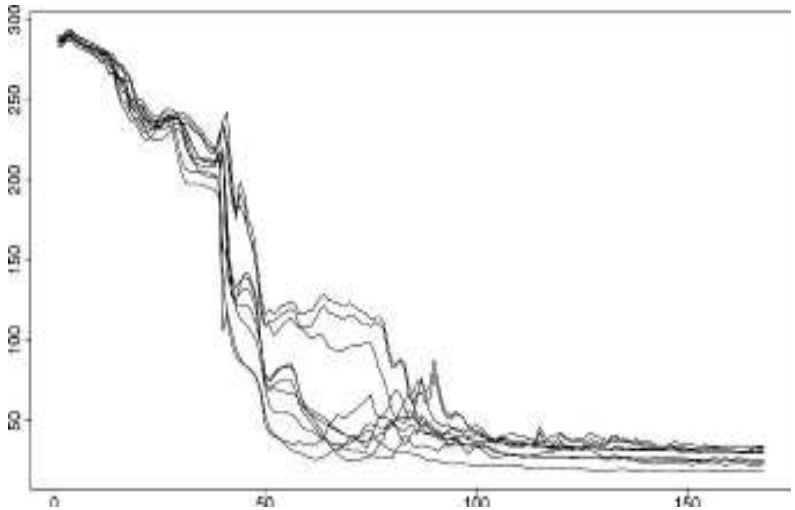


FIG.: 10 courbes prédites avec ACPF à gauche, RML à droite

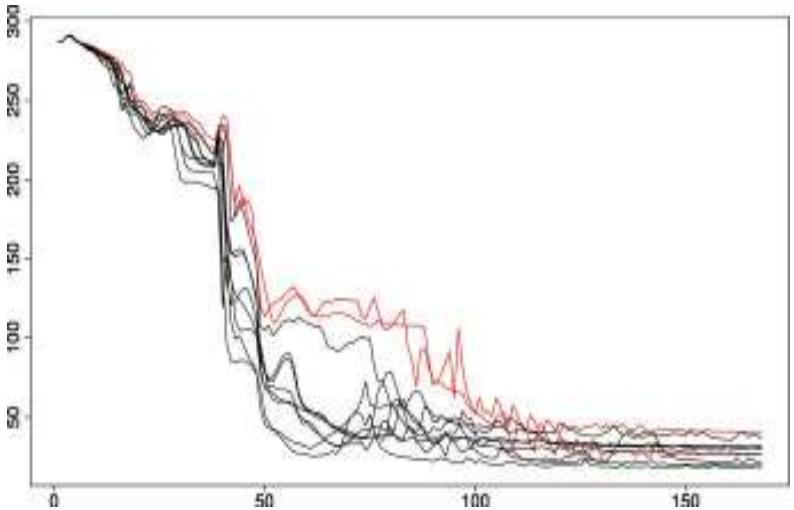


FIG.: Les 10 vraies courbes

2 courbes mal prédites en rouge : *mauvais échantillonnage*.

$$\text{ACPF} \simeq \text{RML}$$

Coefficient d'échange fluide-paroi

200 simulations, mais
44 dimensions en entrée,
665 points de discrétisation.

entrées-sorties difficiles à diviser
dimension estimée : 5

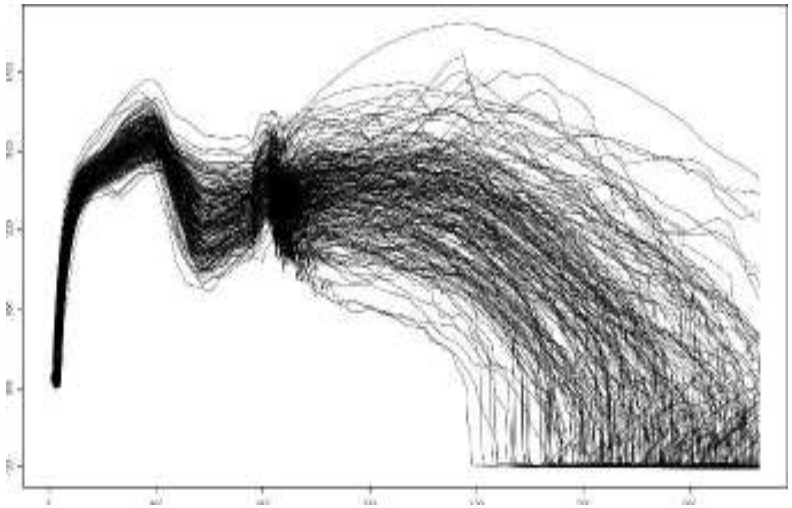


FIG.: Les 200 sorties du code

Coefficient d'échange fluide-paroi

200 simulations, mais
44 dimensions en entrée,
665 points de discrétisation.

entrées-sorties difficiles à diviser
dimension estimée : 5

noir : PCA sans clustering ;
rouge : RML sans clustering.

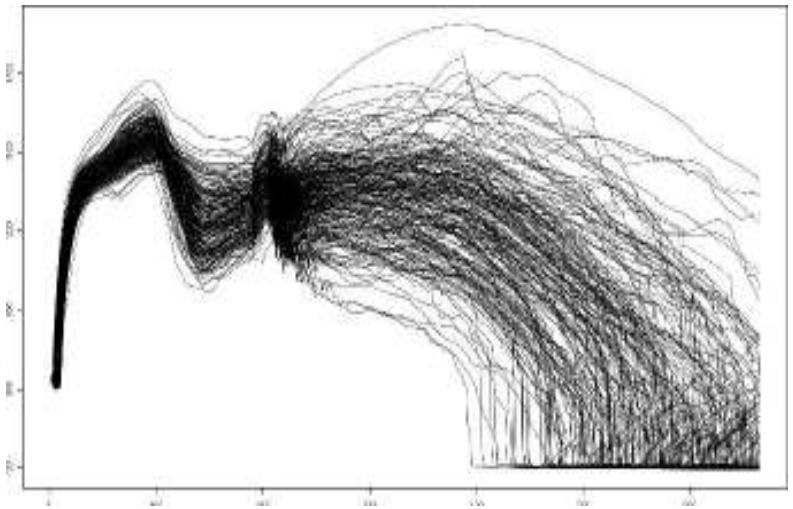


FIG.: Les 200 sorties du code

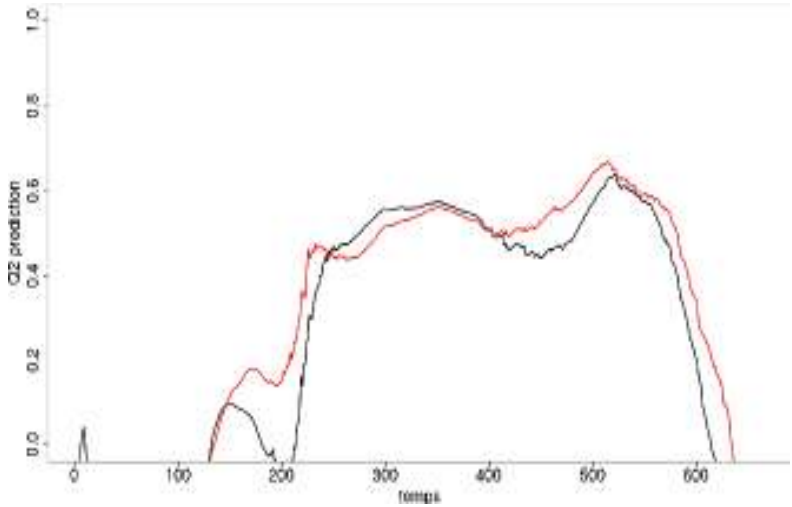


FIG.: $Q2$ de prédiction (100-20)

Coefficient d'échange fluide-paroi

200 simulations, mais
44 dimensions en entrée,
665 points de discrétisation.

entrées-sorties difficiles à diviser
dimension estimée : 5

noir : PCA sans clustering ;
rouge : RML sans clustering.

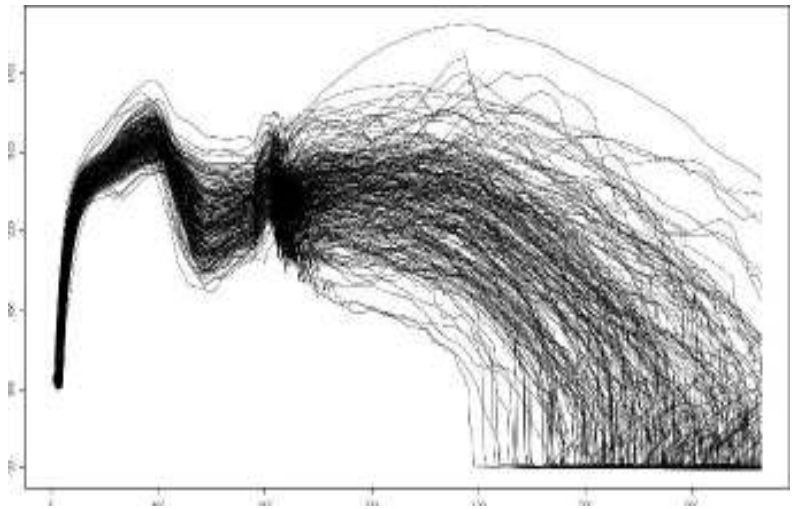


FIG.: Les 200 sorties du code

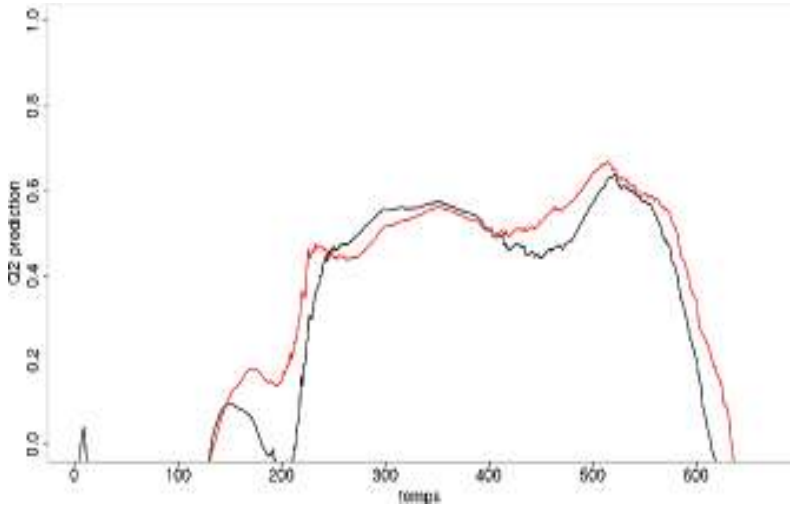


FIG.: $Q2$ de prédiction (100-20)

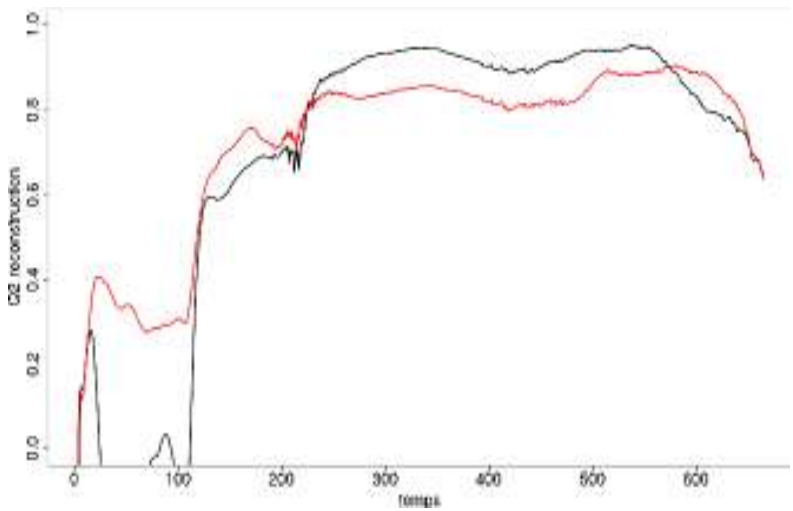
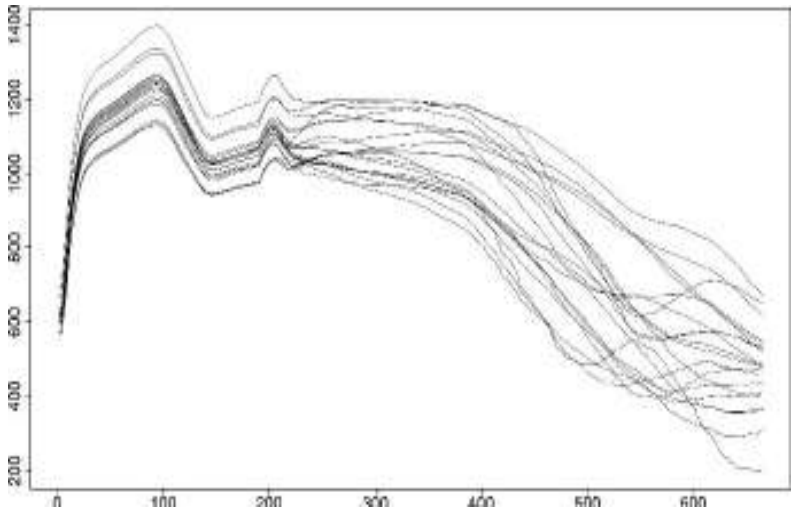


FIG.: $Q2$ de reconstruction

Coefficient d'échange : courbes prédites



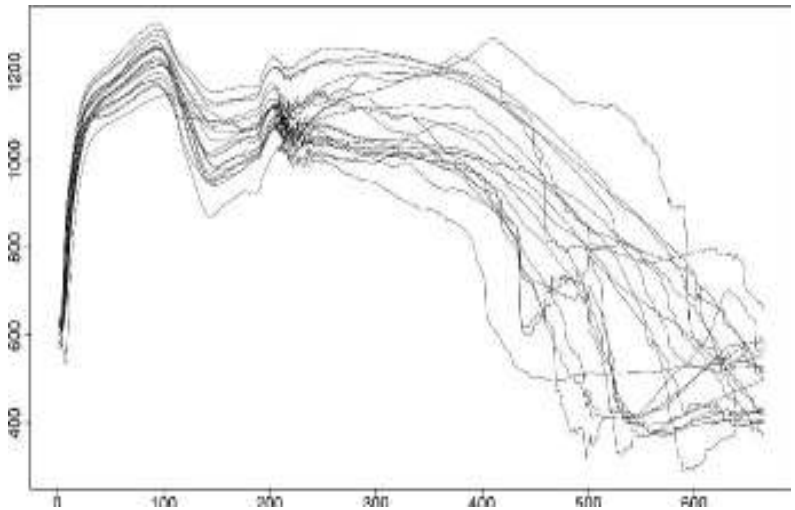


FIG.: 20 courbes prédites avec ACPF à gauche, RML à droite

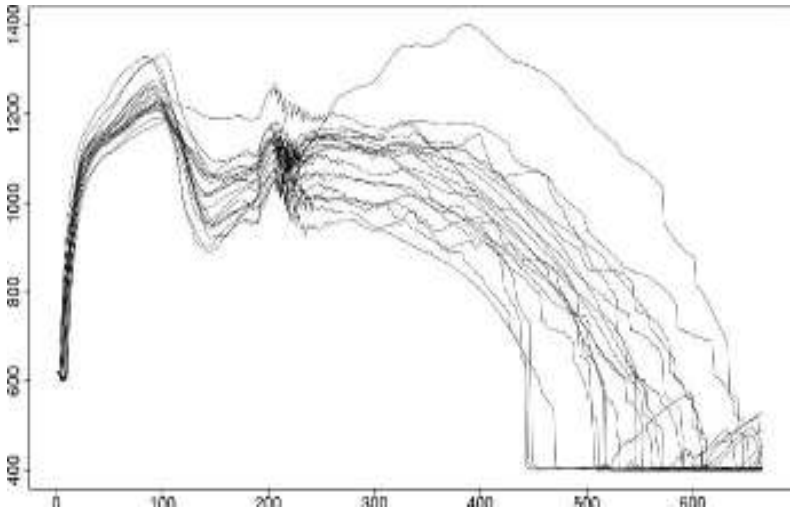


FIG.: Les 20 vraies courbes

"Outlier" mal prédit : mauvais échantillonnage dans cette zone.

- Prédictions ACPF : effet de *lissage* ;
- Prédictions RML : meilleurs début et fin.

Conclusion et perspectives

plan

Résultats mitigés mais :

- Clustering utile pour certaines données ;
- RML parfois mieux adapté (quand ?).

Conclusion et perspectives

plan

Résultats mitigés mais :

- Clustering utile pour certaines données ;
- RML parfois mieux adapté (quand ?).

Algorithme RML + reconstruction à améliorer.

encore plusieurs paramètres à optimiser (automatiquement ?).

Régression : tenir compte des corrélations inter-coefficients.

Conclusion et perspectives

plan

Résultats mitigés mais :

- Clustering utile pour certaines données ;
- RML parfois mieux adapté (quand ?).

Algorithme RML + reconstruction à améliorer.

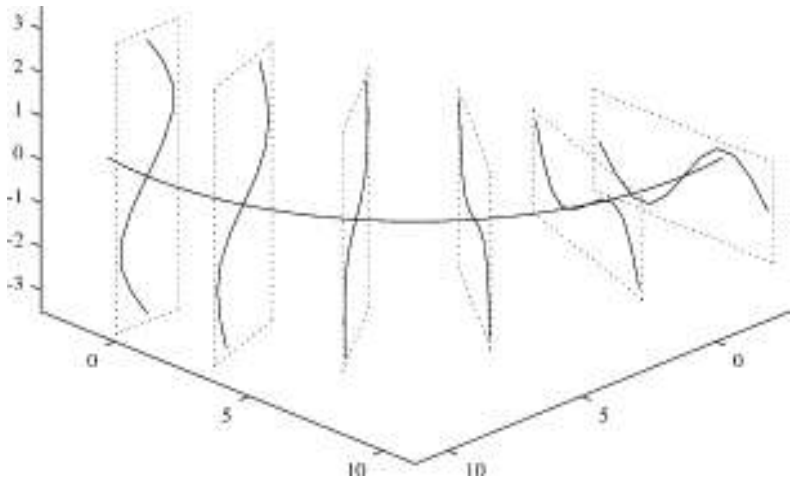
encore plusieurs paramètres à optimiser (automatiquement ?).

Régression : tenir compte des corrélations inter-coefficients.

Méthode alternative à explorer

Courbes, surfaces principales (T. Hastie, 1984 [3]) "fonctionnelles"

Exemple de surface principale en $2D$:



A. M. Farahmand, C. Szepesvári, and J-Y. Audibert.

Manifold-Adaptive Dimension Estimation.

In *24th International Conference on Machine Learning*, pages 265–272, Corvalis, Oregon, USA, 2007.

J. H. Friedman and W. Stuetzle.

Projection Pursuit Regression.

Journal of the American Statistical Association, 76, 1981.

T. Hastie.

Principal Curves and Surfaces.

PhD thesis, Stanford University, 1984.

T. Lin and H. Zha.

Riemannian Manifold Learning.

IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 30 :796–809, 2008.

M. Saerens, A. Pirotte, and F. Fouss.

Computing Dissimilarities between Nodes of a Graph.

Technical report, Université catholique de Louvain, 2004.

Détermination des voisinages

◂ Manifold Learning

Méthode utilisée par T. Lin & H. Zha :
Riemaniann Manifold Learning [4]

Définition : visibilité depuis un noeud

v est voisin de p si aucun autre point r ne vérifie à la fois

$$\|r - p\| < \|v - p\| \text{ et}$$
$$\langle p - r, v - r \rangle < 0.$$

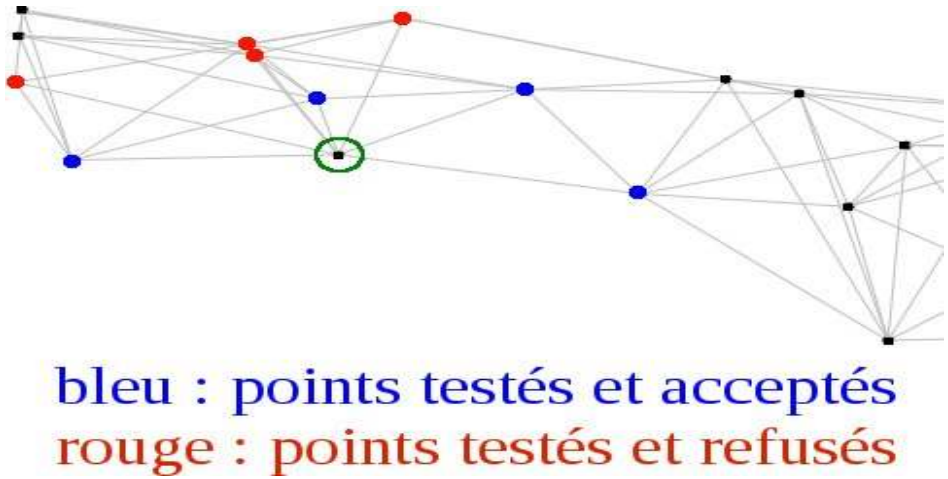


FIG.: Exemple : voisinage du sommet entouré en vert.

Estimation de la dimension

◂ Manifold Learning

Manifold-adaptive dimension estimation, A. M. Farahmand et al. [1]

Idée

Pour une distribution uniforme en dimension d, la probabilité de trouver un élément dans une boule de rayon r est $\propto r^d$.

Supposant la variété à estimer régulière et uniformément échantillonnée :

$\mathbb{P}(Y \in B(y_i, r)) = \eta(y_i, r) r^d$, avec $\eta(y_i, .) = \eta_0^{(i)}$ au voisinage de 0.

Estimation de la dimension

Manifold-adaptive dimension estimation, A. M. Farahmand et al. [1]

Idée

Pour une distribution uniforme en dimension d, la probabilité de trouver un élément dans une boule de rayon r est $\propto r^d$.

Supposant la variété à estimer régulière et uniformément échantillonnée :

$\mathbb{P}(Y \in B(y_i, r)) = \eta(y_i, r) r^d$, avec $\eta(y_i, .) = \eta_0^{(i)}$ au voisinage de 0.

Si y_i a k_i voisins proches avec N "grand" : $\mathbb{P}(Y \in B(y_i, r_k^{(i)})) \simeq \frac{k}{N}$,
avec $r_k^{(i)}$ = distance au k^{eme} voisin, $1 \leq k \leq k_i$.

Formule pour d

$\ln \frac{k_i}{N} \simeq \ln \eta_0^{(i)} + d \ln r_{k_i}^{(i)}$, et
$\ln \frac{k_i}{2N} \simeq \ln \eta_0^{(i)} + d \ln r_{\lceil k_i/2 \rceil}^{(i)}$.

$$\hat{d}_i = \frac{\ln 2}{\ln r_{k_i}^{(i)} / r_{\lceil k_i/2 \rceil}^{(i)}}$$

$=$ Estimation locale de la dimension, supposant k_i connu.

Deux options :

- $\hat{d} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \hat{d}_i$;
- $\hat{d} = \arg\max_{d' \in \mathbb{N}^*} \sum_{i=1}^{N} \mathbb{1}_{\hat{d}_i = d'}$.

Quelques aspects pratiques (RML)

◂ Exemples RML

Paramètre utilisateur k = nombre de voisins en chaque courbe.

$\longrightarrow$ Influe sur la forme de la représentation.

Extension possible : k_i local (LTSA ; H. Zha & Z. Zhang, 2003).

Quelques aspects pratiques (RML)

◂ Exemples RML

Paramètre utilisateur k = nombre de voisins en chaque courbe.

$\longrightarrow$ Influe sur la forme de la représentation.

Extension possible : k_i local (LTSA ; H. Zha & Z. Zhang, 2003).

Combien de coordonnées réduites en projection sur le plan tangent ?

- Pas assez : imprécision accumulée sur les coordonnées éloignées.
- Trop : chevauchements de zones si replis de la surface.

Quelques aspects pratiques (RML)

◂ Exemples RML

Paramètre utilisateur k = nombre de voisins en chaque courbe.

$\longrightarrow$ Influe sur la forme de la représentation.

Extension possible : k_i local (LTSA ; H. Zha & Z. Zhang, 2003).

Combien de coordonnées réduites en projection sur le plan tangent ?

- Pas assez : imprécision accumulée sur les coordonnées éloignées.
- Trop : chevauchements de zones si replis de la surface.

Combien d'angles à conserver pour $\cos\theta \simeq \cos\theta'$? (au moins d)

$\longrightarrow$ *Possibilité* : tant que le système est $\simeq$ résoluble,
ajouter une contrainte.

Régression entrées - coordonnées réduites

Données : $(x_1, z_1), \ldots, (x_k, z_k)$ dans le cluster C. $f(x_0) = ?$

Régression entrées - coordonnées réduites

Données : $(x_1, z_1), \ldots, (x_k, z_k)$ dans le cluster C. $f(x_0) = ?$

Modèle utilisé : *Projection Pursuit Regression* ;
J. H. Friedman & W. Stuetzle, 1981 [2].

Proche d'un perceptron feedforward à une couche cachée.
Nuance : lissage non paramétrique aux noeuds intermédiaires.

Régression entrées - coordonnées réduites

Conclusion

Données : $(x_1, z_1), \ldots, (x_k, z_k)$ dans le cluster C. $f(x_0) = ?$

Modèle utilisé : *Projection Pursuit Regression* ;
J. H. Friedman & W. Stuetzle, 1981 [2].

Proche d'un perceptron feedforward à une couche cachée.
Nuance : lissage non paramétrique aux noeuds intermédiaires.

Algorithme

Initialisation $r_i \leftarrow z_i$, $j \leftarrow 1$.

1. **Projection** : déterminer $\alpha_j \in \mathbb{R}^p$ direction de projection.

Régression entrées - coordonnées réduites

Conclusion

Données : $(x_1, z_1), \ldots, (x_k, z_k)$ dans le cluster C. $f(x_0) = ?$

Modèle utilisé : *Projection Pursuit Regression* ;
J. H. Friedman & W. Stuetzle, 1981 [2].

Proche d'un perceptron feedforward à une couche cachée.
Nuance : lissage non paramétrique aux noeuds intermédiaires.

Algorithme

Initialisation $r_i \leftarrow z_i$, $j \leftarrow 1$.

1. **Projection** : déterminer $\alpha_j \in \mathbb{R}^p$ direction de projection.
2. **Pursuit regression** : lissage non paramétrique sur les points $\langle \alpha_j, x_i \rangle, r_i \quad : \quad m_j(\langle \alpha_j, x_i \rangle) \simeq r_i$.
3. $r_i \leftarrow r_i - m_j(\langle \alpha_j, x_i \rangle)$, $j \leftarrow j + 1$ puis étape de projection, jusqu'à obtenir q termes.

Reconstitution non linéaire

◂ Conclusion

Données de l'ensemble d'apprentissage :

- la matrice C des N coefficients réduits ;
- la matrice X des N vecteurs en entrée ;
- la matrice Y des N fonctions discrétisées en sortie ;

Pour un vecteur de coefficients réduits $c_0 = (c_0^{(1)}, \ldots, c_0^{(d)})$, on veut $\hat{y}_0$ estimation de la courbe correspondante.

Reconstitution non linéaire

Conclusion

Données de l'ensemble d'apprentissage :

- la matrice C des N coefficients réduits ;
- la matrice X des N vecteurs en entrée ;
- la matrice Y des N fonctions discrétisées en sortie ;

Pour un vecteur de coefficients réduits $c_0 = (c_0^{(1)}, \ldots, c_0^{(d)})$, on veut $\hat{y}_0$ estimation de la courbe correspondante.

Méthode :

1. recherche du plus proche voisin de c_0 dans C : c_k ;
2. ACP fonctionnelle locale en y_k : base B ;

Reconstitution non linéaire

Conclusion

Données de l'ensemble d'apprentissage :

- la matrice C des N coefficients réduits ;
- la matrice X des N vecteurs en entrée ;
- la matrice Y des N fonctions discrétisées en sortie ;

Pour un vecteur de coefficients réduits $c_0 = (c_0^{(1)}, \ldots, c_0^{(d)})$, on veut $\hat{y}_0$ estimation de la courbe correspondante.

Méthode :

1. recherche du plus proche voisin de c_0 dans C : c_k ;
2. ACP fonctionnelle locale en y_k : base B ;
3. calcul des N vecteurs de coefficients ACP : $V = Y.B$;
4. algorithme PPR : $C \longrightarrow V$;

Reconstitution non linéaire

Conclusion

Données de l'ensemble d'apprentissage :

- la matrice C des N coefficients réduits ;
- la matrice X des N vecteurs en entrée ;
- la matrice Y des N fonctions discrétisées en sortie ;

Pour un vecteur de coefficients réduits $c_0 = (c_0^{(1)}, \ldots, c_0^{(d)})$, on veut $\hat{y}_0$ estimation de la courbe correspondante.

Méthode :

1. recherche du plus proche voisin de c_0 dans C : c_k ;
2. ACP fonctionnelle locale en y_k : base B ;
3. calcul des N vecteurs de coefficients ACP : $V = Y.B$;
4. algorithme PPR : $C \longrightarrow V$;
5. estimation de v_0, puis de y_0.