
Introduction aux modèles de substitution

Aussi appelés *surrogate models*, ou *metamodels*.

J-B. Blanchard^{1,a}

¹Den-Service de thermo-hydraulique et de mécanique des fluides (STMF), CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

Résumé Cette note introduit la notion de modèle de substitution en proposant une méthodologie générale d'utilisation et les avantages des différents modèles. À partir d'un problème physique simple, plusieurs modèles sont testés en suivant un principe de parcimonie, c'est-à-dire en partant des techniques les plus simples pour considérer ensuite celles plus complexes.

1 Introduction

De nombreux domaines scientifiques font appel de nos jours à des outils de modélisation et de simulation numérique. Ces derniers sont très utiles pour tester un grand nombre d'hypothèses, permettant de limiter, par exemple, le nombre d'essais en laboratoire à réaliser, procédant ainsi à un gain substantiel de temps et de moyens. La précision numérique obtenue avec ces simulations, notamment grâce aux moyens de calcul toujours plus performants, tout comme la grande précision des mesures expérimentales auxquelles ces simulations sont confrontées, ont contribué à l'essor d'une nouvelle discipline permettant de qualifier la validité des analyses : la quantification des incertitudes.

L'utilisation la plus évidente de cette dernière est la comparaison et la validation des modélisations physiques implémentées dans les codes de simulation numérique, grâce aux données expérimentales. La maîtrise des phénomènes aléatoires et des méconnaissances caractérisant certaines données permet, par exemple, d'assurer que les valeurs des variables prédites par la simulation numérique sont en dessous de seuils critiques (de sûreté). Cette étape, cruciale pour la caractérisation du degré de confiance en un résultat, est toutefois coûteuse car elle nécessite souvent un grand nombre de calculs pour converger. L'utilisation de modèles de substitution - des modèles mathématiques approximant les réponses du modèle numérique et dont les temps d'évaluation sont négligeables - est alors un moyen de réduire le coût de cette étape.

1.1 Présentation du cas d'application

Le dispositif expérimental utilisé par la suite est constitué d'une plaque plane, immergée dans un écoulement fluide de température constante (de valeur T_∞) et dont les conditions d'écoulement sont connues. Ce problème est unidimensionnel : la largeur du solide est fixée à $2e$ (suivant la

direction x) et la longueur est considérée infinie (représentée sans borne suivant la direction y).

Le but de cette expérience est de mesurer la température de la plaque en tout point (suivant x) et tout temps (noté t), qu'on exprime en terme de jauge thermique, notée θ , à partir de la température initiale de la plaque (notée T_i), comme :

$$\theta(x, t) = \frac{T(x, t) - T_i}{T_\infty - T_i} \quad (1)$$

Cette notion de jauge thermique est utile pour estimer certaines propriétés de l'interface solide-liquide, comme le nombre de Biot (noté B_i). Le calcul de la jauge thermique peut être fait de manière analytique, sous certaines conditions en calculant la série infinie suivante :

$$\theta(x_{ad}, t_{ad}) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \cos(\omega_n x_{ad}) \exp\left(-\frac{1}{4} \omega_n^2 t_{ad}\right) \quad (2)$$

où les paramètres d'origine (t et x) sont remplacés par des grandeurs adimensionnées (annotées ad), définies comme $x_{ad} = x/e$ et $t_{ad} = t \times 4\alpha/e^2$, α étant la diffusivité thermique (propriété de la plaque). La position adimensionnée évolue donc entre 0 et 1 et le temps adimensionné (qui est un temps caractéristique) sera compris entre 0 et 10. Les conditions et termes spécifiques ne seront pas détaillés ici (*c.f.* Ref [1]).

Il est possible de programmer une fonction approchante du modèle analytique : une troncature sur le nombre d'éléments de la série à calculer (*c.f.* équation 2) doit être choisie. Cette fonction sera appelée "le code" par la suite. Les propriétés physiques de la plaque sont fixées en définissant son matériau, ici un polymère, connu sous le nom de Téflon. La fig. 1 représente les évolutions de la jauge thermique en fonction de la position pour différentes valeurs de temps (*c.f.* fig. 1a), en fonction du temps pour différentes positions (*c.f.* fig. 1b) ou en fonction des deux paramètres (*c.f.* fig. 1c).

Plusieurs modèles de substitution vont être utilisés pour remplacer le modèle analytique en utilisant une base d'apprentissage de 40 points dans le plan (t_{ad}, x_{ad}) et une base de tests contenant 2000 points dans ce même plan.

a. e-mail : jean-baptiste.blanchard@cea.fr

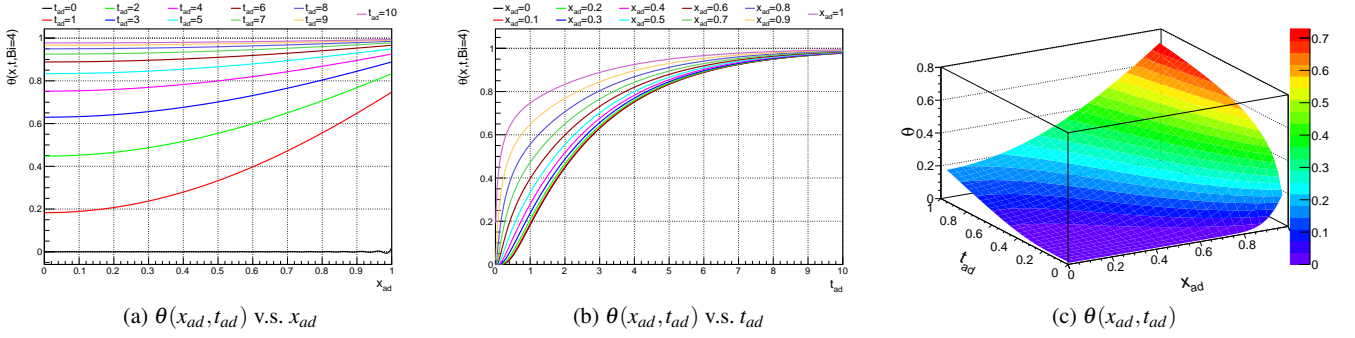


FIGURE 1: Évolution de la jauge thermique en fonction, soit de la position pour différentes valeurs de temps (a), soit du temps pour différentes positions (b) soit dépendant des deux paramètres (c).

1.2 Méthodologie commune aux différents modèles

Les modèles de substitution introduits ici nécessitent une base d'apprentissage, notée \mathcal{L} , de taille n_S , définie comme :

$$\mathcal{L} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i \in [1, n_S]}, \text{ où } \mathbf{x}_i = (x_i^1 \dots x_i^{n_X}). \quad (3)$$

\mathcal{C} représente le code, \mathbf{x}_i est la $i^{\text{ème}}$ réalisation du vecteur des variables aléatoires d'entrée \mathbf{X} , de dimension n_X et y_i est la réalisation correspondante de la variable aléatoire de sortie Y ($y_i = \mathcal{C}(\mathbf{x}_i)$). \mathcal{L} peut être un ensemble de mesures existantes ou un plan d'expériences généré dans ce but précis.

L'estimation de la grandeur d'intérêt est notée $\hat{y} = M(\mathbf{x})$, où M représente le modèle de substitution. Il est possible d'avoir une première estimation de la qualité du modèle obtenu en calculant, sur \mathcal{L} , des critères tel que le R^2 ou l'écart quadratique moyen (MSE^1) :

$$MSE = \frac{1}{n_S} \sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \hat{y}_i)^2 \text{ et } R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \bar{y})^2},$$

où \bar{y} représente la moyenne de la grandeur d'intérêt sur \mathcal{L} .

Un autre critère de qualité, le coefficient de prédictivité noté Q^2 , peut être calculé en utilisant une base dite de test (notée \mathcal{P} , de taille n_P) :

$$Q^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_P} (y_i - \hat{y}(\mathbf{x}_i))^2}{\sum_{i=1}^{n_P} (\bar{y} - y_i)^2}, \mathbf{x}_i \in \mathcal{P}$$

Plutôt qu'utiliser une base de test (dont la mise à disposition peut s'avérer coûteuse), il est souvent possible de faire de la validation croisée : obtenir une estimation de $\hat{y}_i = M'(\mathbf{x}_i)$ où M' représente le modèle dont l'apprentissage s'est fait sur \mathcal{L} en enlevant le $i^{\text{ème}}$ point. En répétant cela n_S fois, on peut obtenir l'écart quadratique moyen (MSE_{Loo}) et le critère de qualité (Q^2_{Loo}) :

$$MSE_{Loo} = \frac{1}{n_S} \sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \hat{y}_i)^2 \text{ et } Q^2_{Loo} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n_S} (y_i - \bar{y})^2}$$

1. Mean Square Error

Dans ces équations, *Loo* signifie *Leave-one-out* (un cas particulier de validation croisée).

Le critère le plus utile est celui du Q^2 : plus il est proche de 1 et plus le modèle est prédictif.

Finalement plusieurs modèles de substitution peuvent souffrir de problème de sur apprentissage : la taille de la base d'apprentissage étant restreinte, le risque est que le modèle soit surparamétré, reproduisant parfaitement les observations mais qu'il soit non régulier entre celles-ci. Des techniques de régularisation existent donc pour limiter cela, reposant souvent sur l'utilisation d'une petite fraction de la base d'apprentissage.

2 Méthode de projection et régression

2.1 Régression linéaire

Le but de cette méthode est d'essayer d'écrire la quantité d'intérêt sous la forme

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_R} \beta_i h_i(\mathbf{x}) = \mathbf{h}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\beta}$$

où les $\{\beta_i\}_{i \in [0, n_R]}$ sont les coefficients de la régression et les $\{h_i\}_{i \in [0, n_R]}$, les régresseurs, sont des fonctions de base (polynômes, fonctions trigonométriques...) [2], n_R étant le nombre de régresseurs. Dans le cas où le nombre de coefficients à déterminer est plus petit que le nombre de points dans la base d'apprentissage, la détermination de ces coefficients revient à la minimisation de $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\boldsymbol{\beta}\|^2$ pour \mathbf{H} la matrice des régresseurs, qu'on peut écrire $\mathbf{H} = (\mathbf{h}^T(\mathbf{x}_1) \dots \mathbf{h}^T(\mathbf{x}_{n_S}))^T$

La forme générale de la solution est alors

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{H}(\mathbf{H}^T\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{y},$$

qui est souvent très rapide à obtenir. Cette écriture matricielle permet de voir que l'estimation de $\hat{\mathbf{y}}$ est la projection de \mathbf{y} dans le sous-espace de \mathbb{R}^{n_S} engendré par les colonnes de la matrice \mathbf{H} .

La fig. 2a présente la distribution de la jauge thermique estimée par le modèle (les régresseurs étant des polynômes d'ordre 1) en fonction de celle issue du code original (modèle analytique, *c.f.* équation 2), pour la base de test après apprentissage. Le résultat montre que le système d'origine ne peut pas être considéré comme linéaire.

2.2 Expansion du chaos polynomial

Le concept de chaos polynomial repose sur la théorie du chaos homogène de Wiener [3], introduit en 1938 et généralisé par la suite. L'idée principale est à nouveau de projeter \mathbf{X} et Y sur un sous-espace vectoriel de dimension finie en estimant les coefficients de ces projections à partir d'un nombre réduit d'appels au code. La base de ce sous-espace vectoriel est composée de polynômes orthogonaux et un choix doit être fait quant au degré maximal du produit tensoriel résultant (plus le degré demandé est grand, plus la base d'apprentissage devra aussi être grande).

Un avantage important de cette méthode et qu'elle permet d'interpréter les valeurs des coefficients comme des estimations des indices de Sobol pour les entrées considérées, si les lois de probabilité des entrées ont été projetées sur leur base de polynômes orthogonaux naturels. Toutefois cette méthode montre ses limites si la loi de probabilité de sortie Y montre des discontinuités.

La fig. 2b présente la distribution de la jauge thermique estimée par le modèle (de degré maximal 4) en fonction de celle issue du code original, pour la base de test après apprentissage. Le résultat, cette fois, décrit bien le comportement fourni par le code.

3 Méthodes d'interpolation

3.1 K plus proches voisins

Cette méthode estime la valeur possible du code \hat{y} , pour une configuration d'entrée \mathbf{x} n'étant pas dans la base d'apprentissage, comme la moyenne pondérée des n_K plus proches voisins du point en question [4]. Ceci peut s'écrire

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{n_K} \omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \mathcal{C}(\mathbf{x}_i),$$

où la fonction de poids est, en général, l'inverse de la distance

$$\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \frac{1/d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}{\sum_{j=1}^{n_K} 1/d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}$$

Cette méthode ne dépend que du choix de la fonction de poids et du nombre de voisins à utiliser. Ce dernier critère peut être optimisé par validation-croisée et les calculs de distances peuvent se faire en parallèle (par exemple sur plusieurs processeurs).

La fig. 2c présente la distribution de la jauge thermique estimée par le modèle (en utilisant $n_K=4$) en fonction de celle issue du code original, pour la base de test après apprentissage. Le résultat est meilleur que celui obtenu en section 2.1, mais n'est quand même pas pleinement satisfaisant.

3.2 Krigeage

Le krigeage est une famille de méthodes, développée dans les années 70 [5], qui utilise la corrélation spatiale entre les différentes observations pour faire des prédictions en des sites inconnus. Cela est fait en choisissant une fonction de corrélation spatiale et en cherchant une estimation optimale de ses paramètres. L'hypothèse sous-jacente repose sur l'assimilation de la sortie du code à la réalisation d'un processus gaussien, décomposable en une partie déterministe $m(\mathbf{x})$ et une partie stochastique $Z(\mathbf{x})$.

Ce modèle peut ainsi être vu comme un générateur de fonctions, pouvant prendre en compte des incertitudes sur les valeurs mesurées, fournies en entrée dans la base d'apprentissage. L'estimation de critères de qualité par *Leave-one-out* est aussi facilement réalisable (*c.f.* section 1.2).

Un avantage important de cette méthode est qu'elle permet de disposer, en plus d'une prédiction, de l'erreur associée. Cette erreur fournit alors un intervalle de confiance et permet de développer des stratégies efficaces de construction de plans d'expériences séquentiels (ajout de calculs avec le "vrai modèle" là où ils apportent le plus d'informations).

Les fig. 2e et 2d représentent l'application du krigeage sur notre cas d'utilisation en considérant, respectivement, seulement une dépendance au temps adimensionné ou en l'appliquant sur la base de test complète après apprentissage. Dans les deux cas, l'accord obtenu entre le modèle de substitution et le code est bon.

4 Méthode d'apprentissage par réseau de neurones

Un réseau de neurones est un modèle connectant plusieurs neurones formels, dont le principe de fonctionnement fut décrit pour la première fois en 1962 et appelé le perceptron [6]. Un neurone formel est un objet qui reçoit des informations et calcule une activité (a) comme $a = \sum_{i=1}^{n_I} \omega_i x_i$ où les ω sont appelés poids synaptiques (n_I dépendant de l'architecture du réseau). Un signal de sortie s est calculé à partir de son activité (plus un biais b), transformée par une fonction de transfert : $s = f(b + \sum_{i=1}^{n_X} \omega_i x_i)$

Il existe plusieurs types d'architecture, parmi lesquelles celles dites complètes (tous les neurones sont connectés entre eux) ou par couche (les neurones sont connectés à leurs homologues des couches précédentes et suivantes). Le processus d'apprentissage est celui décrit en section 1.2 pour trou-

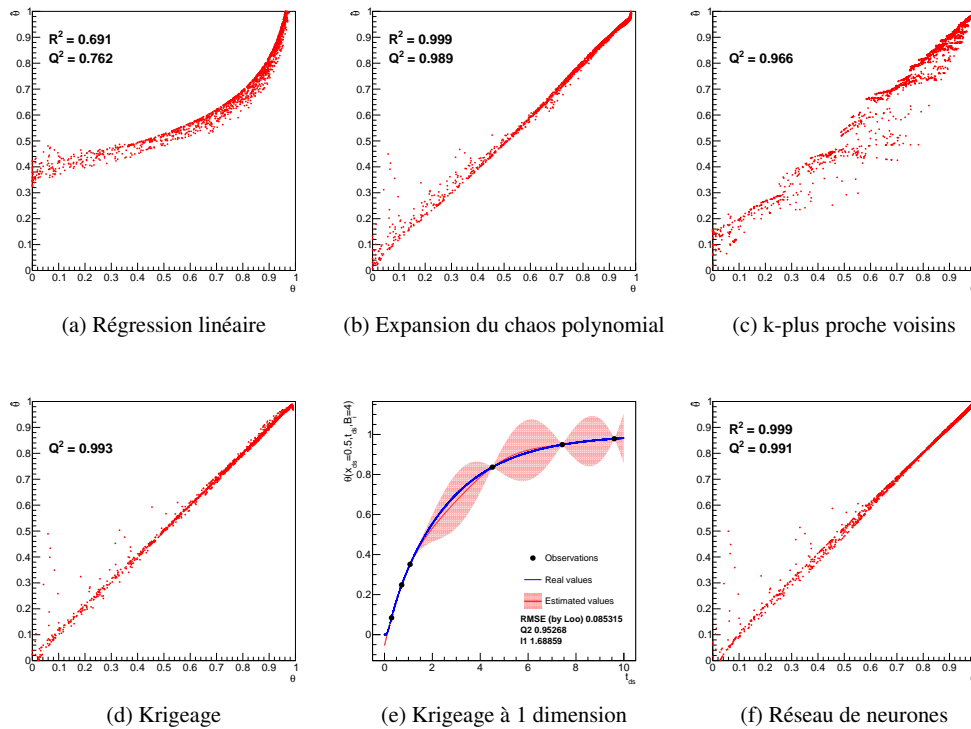


FIGURE 2: Comparaison des estimations fournies par les modèles de substitution ($\hat{\theta}$) avec les résultats fournis par le code (θ), en utilisant une base commune d'apprentissage de 40 points (a-d,f). (e) représente le résultat d'un krigage à une dimension pour visualiser l'intervalle de confiance estimé.

ver la valeur optimale des poids synaptiques tout en évitant le surapprentissage.

La fig. 2f représente la distribution de la jauge thermique estimée par le modèle (contenant 3 couches de 2 neurones chacune) en fonction de celle issue du code original, pour la base de test après apprentissage. Le résultat semble à nouveau bien décrire le comportement du code.

5 Conclusion

Le concept de modèle de substitution a été introduit dans cette note, en présentant certains avantages à leur utilisation et en introduisant une méthodologie générique. Différents type de modèle ont été appliqués à un problème physique pour illustrer leur utilisation. La stratégie recommandée est bien de tester les modèles les plus simples avant de passer à ceux plus compliqués, sachant que pour ces derniers, chacun a ses avantages et inconvénients et qu'il n'y en a pas de meilleur qu'un autre [7, 8, 9, 10].

Références

1. J-B. Blanchard, G. Damblin, J-M. Martinez, G. Arnaud, and F. Gaudier, "The uranie platform : an open-source software for optimisation, meta-modelling and uncertainty analysis," *EPJ Nuclear Sci. Technol.*, vol. 5, p. 4, 2019.
2. Wikistat, "Régression linéaire simple — wikistat," 2016. [En ligne; Page disponible le 21-janvier-2016].
3. N. Wiener, "The homogeneous chaos," *American Journal of Mathematics*, vol. 60, no. 4, pp. 897–936, 1938.
4. N. S. Altman, "An introduction to kernel and nearest-neighbor nonparametric regression," *The American Statistician*, vol. 46, no. 3, pp. 175–185, 1992.
5. G. Matheron, "La théorie des variables régionalisées, et ses applications," *Fascicule 5 in Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau*, 1970.
6. F. Rosenblatt, *Principles of neurodynamics : perceptrons and the theory of brain mechanisms*. Report (Cornell Aeronautical Laboratory), Spartan Books, 1962.
7. M. De Lozzo, "Substitution de modèle et approche multifidélité en expérimentation numérique," *Journal de la Société Française de Statistique*, vol. 156, no. 4, pp. 21–55, 2015.
8. K.-T. Fang, R. Li, and A. Sudjianto, "Design and modeling for computer experiments," *Computer Science & Data Analysis Series. Ed. Chapman & Hall/CRC*, 2006.
9. T. W. Simpson, J. Poplinski, P. N. Koch, and J. K. Allen, "Metamodels for computer-based engineering design : survey and recommendations," *Engineering with computers*, vol. 17, no. 2, pp. 129–150, 2001.
10. L. L. Gratiet, S. Marelli, and B. Sudret, "Metamodel-based sensitivity analysis : polynomial chaos expansions and gaussian processes," *Handbook of Uncertainty Quantification*, pp. 1–37, 2016.