

COMPOSITION DE POLYNÔMES POUR L'APPRENTISSAGE STATISTIQUE DE FONCTIONNELLES COMPLEXES

La simulation numérique joue un rôle primordial pour la compréhension des phénomènes physiques complexes. Des codes numériques sophistiqués sont développés, dont les temps d'exécution peuvent s'avérer extrêmement longs malgré des puissances de calcul toujours plus importantes. Leur utilisation pour la conception et la garantie de nouveaux systèmes physiques nécessite ainsi d'associer à chaque sortie du code un métamodèle, c'est-à-dire une approximation mathématique rapide à évaluer, permettant d'en prédire la valeur en tout point du domaine des entrées. Ce travail propose de considérer la composition de polynômes pour la construction de tels métamodèles, cela pouvant s'avérer très efficace pour l'apprentissage statistique de fonctionnelles fortement non linéaires à partir d'information réduite.

La conception et la garantie de systèmes physiques par la simulation nécessitent le développement de codes prédictifs qu'il faut généralement exécuter en un très grand nombre de points. Lorsque le coût numérique d'un appel au code est important, il est nécessaire d'approcher les sorties du code par un métamodèle. Dans cet objectif, la régression par processus gaussien est une technique d'apprentissage statistique très utilisée en raison du compromis qu'elle permet en matière de complexité, d'efficacité et de contrôle des erreurs de prédiction [1,2]. Cette technique est basée sur l'hypothèse que chaque sortie du code peut être vue comme une réalisation particulière d'un processus gaussien. Conditionner ce processus par les évaluations disponibles du code permet la construction de prédicteurs souvent très efficaces. Sans surprise, les capacités prédictives de ces prédicteurs dépendent fortement des propriétés statistiques du processus considéré. Bien choisir sa fonction moyenne et sa fonction de covariance est ainsi le point clé d'une telle technique d'apprentissage.

En particulier, on constate que la projection de la fonction moyenne sur un ensemble réduit de polynômes bien choisis peut fortement améliorer les capacités prédictives du métamodèle final [3]. Notre travail a consisté à proposer une approche alternative qui revient à écrire cette fonction sous la forme d'une composition de deux polynômes. Ainsi, au lieu de rechercher une base de projection polynomiale de taille réduite, dont les coefficients seraient correctement identifiés, l'idée est maintenant de projeter la fonction moyenne sur un très grand nombre de polynômes. En effet, en composant deux polynômes, on obtient un nouveau polynôme, dont le degré peut être beaucoup plus élevé, mais dont le nombre de grandeurs indépendantes le caractérisant reste limité.

La principale difficulté d'une telle représentation concerne l'identification des paramètres associés aux deux polynômes composés. En effet, l'évolution du polynôme composé peut être très sensible à ces paramètres. Par ailleurs, des valeurs distinctes de ces paramètres peuvent conduire à la même représentation poly-

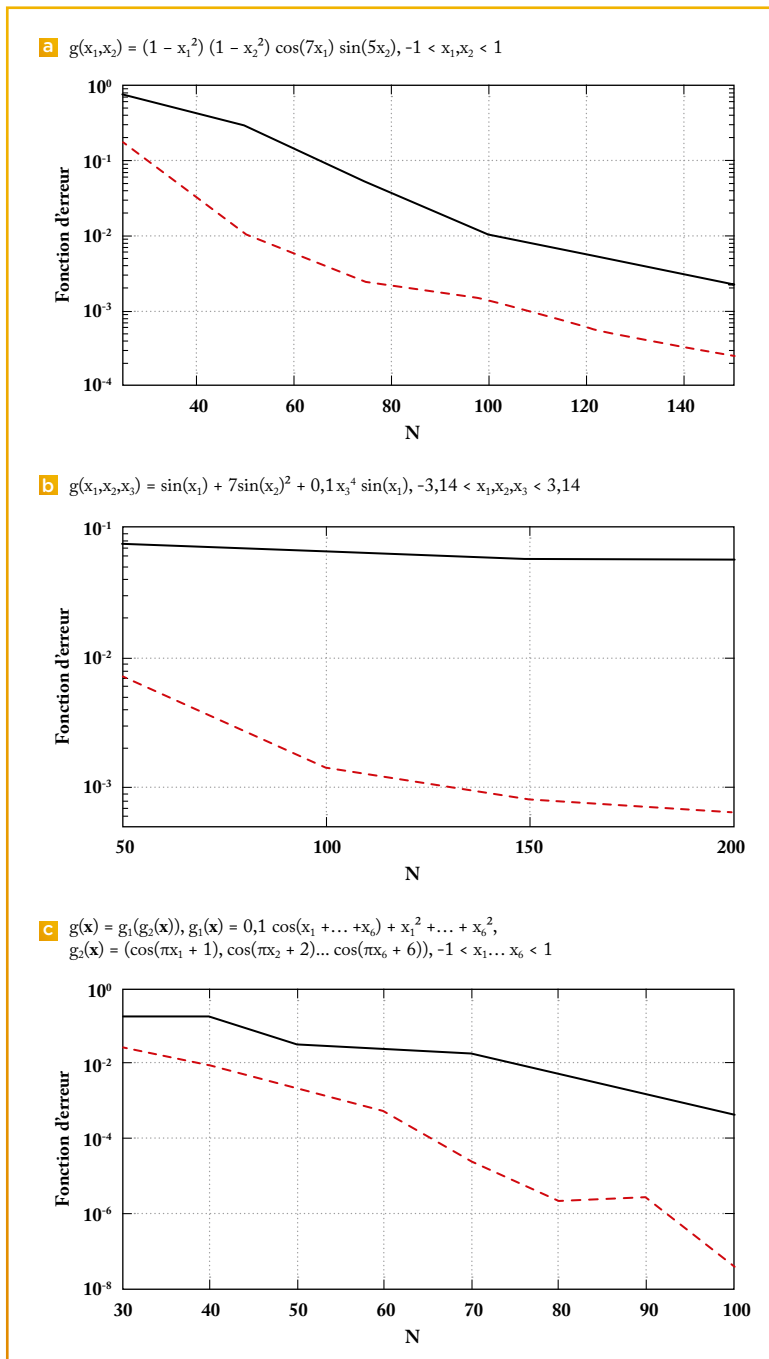


Figure 1

➔ Pour trois fonctions tests, notées $g(\mathbf{x})$, comparaison des capacités prédictives de deux métamodèles en fonction du nombre d'appels au code utilisé pour l'apprentissage et noté N . La fonction d'erreur représentée est la moyenne de l'intégrale du carré de la différence entre les valeurs de g et les valeurs prédites par chaque métamodèle. Noir continu : la fonction moyenne est directement projetée sur des polynômes bien choisis. Rouge pointillé : la fonction moyenne est approchée par une composition de deux polynômes. L'approche par composition de deux polynômes conduit à une réduction des erreurs de prédiction jusqu'à plusieurs ordres de grandeur.

nomiale finale, ce qui ne facilite pas leur identification. Pour surmonter ces difficultés, plusieurs algorithmes spécifiques ont été proposés, dont on peut trouver les détails dans la référence [4]. Les possibilités d'une telle approche ont ensuite été étudiées sur une série de fonctions classiques, dont une partie des résultats peut être visualisée sur la figure 1. Sur cette figure, on constate que la forme proposée pour la fonction moyenne permet une très nette amélioration des capacités prédictives des métamodèles. En effet, en se basant sur la même information pour l'apprentissage, on observe une réduction

des erreurs de prédiction pouvant aller jusqu'à plusieurs ordres de grandeur.

Finalement, l'objectif de ce travail est de proposer une nouvelle forme de métamodèle, basée sur la composition de polynômes. Une telle structure permet en effet d'engendrer un espace polynomial de très grande dimension, à partir d'un nombre réduit de paramètres. Cela peut conduire à des métamodèles aux propriétés prédictives renforcées par rapport à ceux classiquement utilisés dans la littérature, en particulier lorsque le nombre d'appels au code doit être limité.

RÉFÉRENCES

- 1 T. J. SANTNER, B. J. WILLIAMS, W. I. NOTZ, *The Design and Analysis of Computer Experiments*, New York, Springer (2003).
- 2 C. CANNAMELA, L. LE GRATIET, J. GARNIER, "Construction d'un métamodèle pour des codes à plusieurs niveaux de fidélité", *Revue chocs*, **48**, p. 5-14 (2017).
- 3 P. KERSAUDY, B. SUDRET, N. VARSIER, O. PICON, "A new surrogate modeling technique combining kriging and polynomial chaos expansions – Application to uncertainty analysis in computational dosimetry", *J. Comput. Phys.*, **286**, p. 103-117 (2015).
- 4 G. PERRIN, C. SOIZE, S. MARQUE-PUCHEU, J. GARNIER, "Nested polynomial trends for the improvement of Gaussian process-based predictors", *J. Comput. Phys.*, **346**, p. 389-402 (2017).