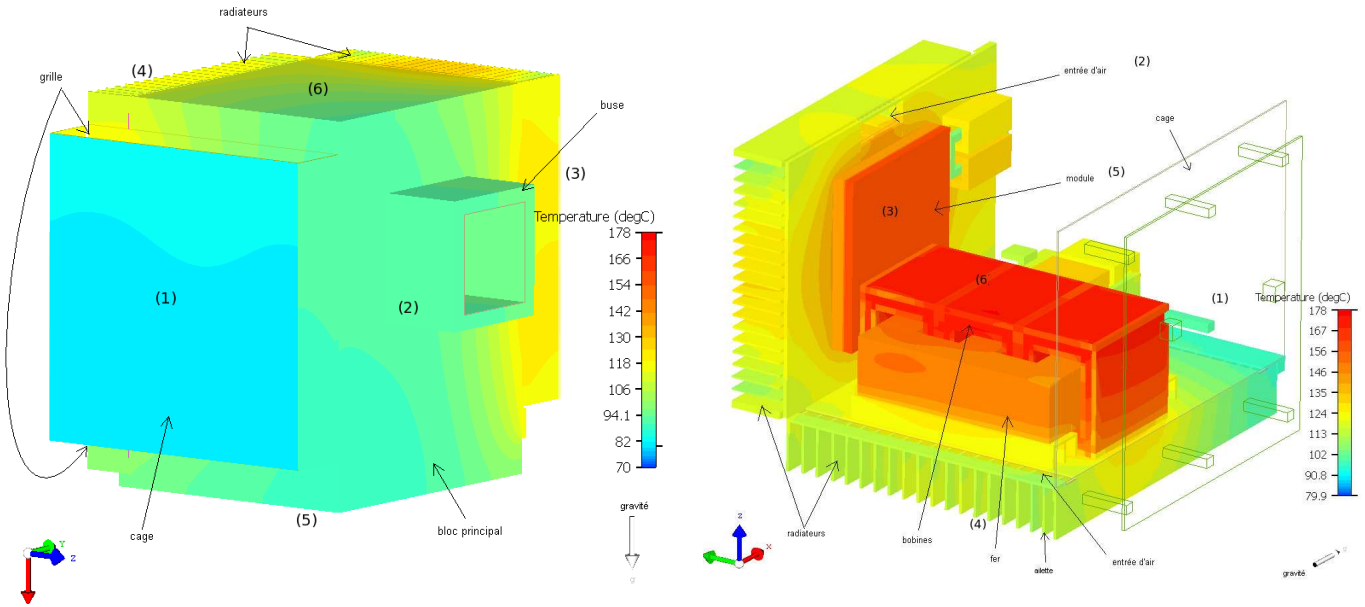
Apprentissage de dynamiques spatio-temporelles par réseaux de neurones artificiels

Matthias De Lozzo
thèse encadrée par Béatrice Laurent (IMT) et Patricia Klotz (ONERA)

Journées MASCOT NUM 2012 - Mercredi 21 mars 2012

Présentation de l'applicatif aéronautique

- **Composants électriques et électroniques**
- **Système de refroidissement** : entrées latérales + buse de sortie
- **Code numérique 3D** $\leftrightarrow$ équations de la physique



2 grands types de comportements $\neq$:

- convection forcée : extraction d'air fonctionnant à 100% ;
- convection naturelle : extraction d'air en panne.

Objectif

On s'intéresse à l'**estimation de la température** :

- **en certains points** d'intérêt ("les sorties $\underline{y}$"),
- **à différents instants** et
- **pour différents cas tests** paramétrés par :
  - u_1, l'entrée "pression" : sol ou vol ;
  - u_2, l'entrée "débit d'extraction" : de 0 à normal ;  robustesse
  - u_3, l'entrée "intensité du courant" ;
  - u_4, l'entrée "température ambiante" ;
  - une température initiale (si régime transitoire) ;
  - une durée de mission (si régime transitoire).

On souhaite une estimation **rapide**, **précise** et **robuste**.

Pour cela, on cherche à construire :

un **modèle de substitution en régime transitoire et permanent**
$\Rightarrow$ **apprentissage statistique** de couples entrées-sorties $(\underline{u}_i, \underline{y}_i)_{i\in\{1,\dots,n\}}$ issus du code numérique 3D.

Plan

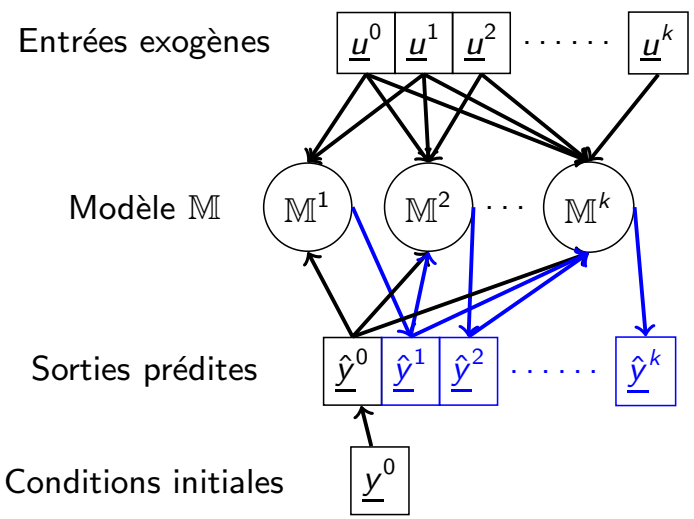
Plan

Apprentissage statistique de données temporelles

Entrées : $\underline{u} = (u_1, ..., u_{n_u}) \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^{n_u}$; sorties : $\underline{y} = (y_1, ..., y_{n_y}) \in \mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^{n_y}$

Régime	permanent	transitoire
Entrées du modèle de référence	$\underline{u}$	$\underline{u}(t)$
Sorties du modèle de référence	$\underline{y}$	$\underline{y}(t)$
Base d'apprentissage	$(\underline{u}_i ; \underline{y}_i)_{i \in \{1,...,n\}}$	$(\underline{u}_i^{k_i} ; \underline{y}_i^{k_i})_{\substack{i \in \{1,...,n\} \\ k_i \in \{0,...,K_i\}}}$
Critère à minimiser (MSE)	$\sum_{1 \leq i \leq n} \|\underline{y}_i - \hat{\underline{y}}_i\|_2^2$	$\sum_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq k_i \leq K_i}} \|\underline{y}_i^{k_i} - \hat{\underline{y}}_i^{k_i}\|_2^2$

Modèle de substitution récursif $\mathbb{M}$



Contraintes en prédiction :

- Conditions initiales : $(\underline{u}^0, \underline{y}^0)$
- À t_k, $\hat{\underline{y}}^k$ connaît seulement :
  - $\hat{\underline{y}}^{k-1}, ..., \hat{\underline{y}}^1, \underline{y}^0$ et
  - $\underline{u}^k, ..., \underline{u}^0$.
- À t_k, $\underline{e}^{k-1} = \underline{y}^{k-1} - \hat{\underline{y}}^{k-1}$
  inconnue : recalage impossible

Approche par série temporelle

- Lennart Ljung, *System identification (2nd ed.) : theory for the user*, Prentice Hall PTR, 1999
- Olivier Nerrand *et al.*, *Training Recurrent Neural Network : Why and How ? An Illustration in Dynamical Process Modeling*, IEEE Transactions on Neural Networks, 1994

Cas linéaire :

$$\underline{\hat{y}}^k = \sum_{i=1}^{\alpha} A_i.\underline{\hat{y}}^{k-i} + \sum_{i=1}^{\beta+1} B_i.\underline{u}^{k-i+1} + \underline{\varepsilon}^k \text{ avec } \underline{\hat{y}}^0 := \underline{y}^0$$

Cas non linéaire :

$$\underline{\hat{y}}^k = f(\underline{\hat{y}}^{k-1}, ..., \underline{\hat{y}}^{k-\alpha}, \underline{u}^k, ..., \underline{u}^{k-\beta}; \underline{w}) + \underline{\varepsilon}^k \text{ avec } \underline{\hat{y}}^0 := \underline{y}^0$$

En pratique

- À t_1, on ne connaît du modèle de référence que $\underline{y}^0$ et $\underline{u}^0, \underline{u}^1$.
- Problème pour utiliser des données avec des pas de temps différents : les considérer comme une entrée ?

Approche par série temporelle

- Lennart Ljung, *System identification (2nd ed.) : theory for the user*, Prentice Hall PTR, 1999
- Olivier Nerrand *et al.*, *Training Recurrent Neural Network : Why and How ? An Illustration in Dynamical Process Modeling*, IEEE Transactions on Neural Networks, 1994

Cas linéaire :

$$\underline{\hat{y}}^k = A_1.\underline{\hat{y}}^{k-1} + B_1.\underline{u}^k + B_2.\underline{u}^{k-1} + \underline{\varepsilon}^k \text{ avec } \underline{\hat{y}}^0 := \underline{y}^0$$

Cas non linéaire :

$$\underline{\hat{y}}^k = f(\underline{\hat{y}}^{k-1}, \underline{u}^k, \underline{u}^{k-1}; \underline{w}) + \underline{\varepsilon}^k \text{ avec } \underline{\hat{y}}^0 := \underline{y}^0$$

En pratique

- À t_1, on ne connaît du modèle de référence que $\underline{y}^0$ et $\underline{u}^0, \underline{u}^1$.
- Problème pour utiliser des données avec des pas de temps différents : les considérer comme une entrée ?

Une alternative aux séries temporelles

La modélisation de la variation instantanée

$\frac{d\underline{\hat{y}}(t)}{dt} = \hat{f}(\underline{u}(t), \underline{\hat{y}}(t); \underline{w})$ où $\hat{f}$ non linéaire en les entrées et les paramètres $\underline{w}$

+ un intégrateur numérique (Euler, Runge-Kutta 4,...)

Ex : $\underline{\hat{y}}^k = \underline{\hat{y}}^{k-1} + \Delta_k . f(\underline{u}^{k-1}, \underline{\hat{y}}^{k-1}; \underline{w})$, $\Delta_k = t_k - t_{k-1}$ et $\underline{\hat{y}}(t_0) := \underline{y}^0$

- Yi-Jen Wang and Chin-Teng Lin, *Runge–Kutta Neural Network for Identification of Dynamical Systems in High Accuracy*, IEEE Transactions on neural networks, 1998
- R.P.M. Marin, P.M. Tasinaffo, E.D. Yano, *Uma análise comparativa entre metodologias de estrutura de integração neural aplicados a sistemas dinâmicos não-lineares*, XVIII Congresso Brasileiro de Automática,2010

Modèle proposé

On s'inspire du modèle précédent en supposant que la dynamique s'écrit :

$$\frac{d\underline{y}(t)}{dt} = f(\underline{u}(t), \underline{y}(t))$$

que l'on injecte dans un développement limité :

$$\begin{aligned} \underline{y}(t_k) &= \underline{y}(t_{k-1}) + \Delta_k \left.\frac{d\underline{y}(t)}{dt}\right|_{t=t_{k-1}} + \frac{1}{2} \left.\frac{d^2\underline{y}(t)}{dt^2}\right|_{t=\xi_k} \Delta_k^2, \ \xi_k \in]t_k, t_{k-1}[\\ &= \underline{y}(t_{k-1}) + \Delta_k \left(f\left(\underline{u}(t_{k-1}), \underline{y}(t_{k-1})\right) + \frac{1}{2} \left.\frac{d^2\underline{y}(t)}{dt^2}\right|_{t=\xi_k} \Delta_k \right) \end{aligned}$$

En approchant le terme non linéaire "dérivée + reste" par un modèle de substitution $\hat{f}$, on obtient le modèle de substitution dynamique :

$$\begin{cases} \underline{\hat{\mathbf{y}}}^{\mathbf{k}} &= \underline{\hat{\mathbf{y}}}^{\mathbf{k-1}} + \mathbf{\Delta_k}.\hat{\mathbf{f}}(\underline{\mathbf{u}}^{\mathbf{k-1}}, \underline{\hat{\mathbf{y}}}^{\mathbf{k-1}}, \mathbf{\Delta_k}; \underline{\mathbf{w}}) \\ \underline{\hat{\mathbf{y}}}^{\mathbf{0}} &= \underline{\mathbf{y}}^{\mathbf{0}} \end{cases}$$

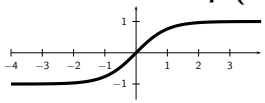
En pratique, $\hat{f}$ est un réseau de neurones artificiel.

Approximation par réseau de neurones artificiel

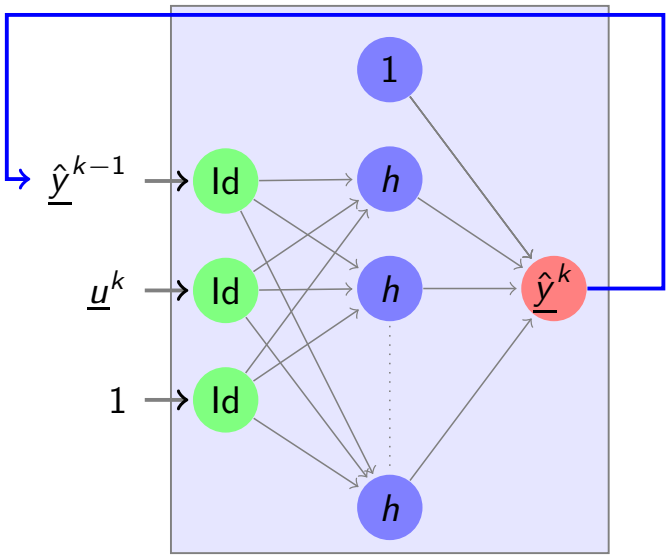
On peut approcher une fonction non linéaire f par un réseau à N neurones à sortie multidimensionnelle réelle $f_{\text{R.N.}} = (f_{1,\text{R.N.}}, ..., f_{n_y,\text{R.N.}})$:

$$f_{l,\text{R.N.}}(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{N} w_i^{(l)} h\left(\sum_{j=1}^{n_x} w_{ij} x_j + w_{i0}\right) + w_0^{(l)}$$

$h(s) = \frac{2}{1+exp(-2s)} - 1$



- Approximateur universel [Hornik *et al. 1989*]
- Modèle parcimonieux [Barron 1993]
- $N(N_x + N_y + 1) + N_y$ paramètres



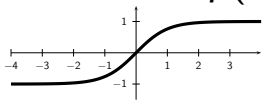
$$\underline{x} = \begin{pmatrix} \hat{\underline{y}}^{k-1} \\ \underline{u}^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_1^{k-1} \\ \vdots \\ \hat{y}_{n_y}^{k-1} \\ u_1^k \\ \vdots \\ u_{n_u}^k \end{pmatrix}$$

Approximation par réseau de neurones artificiel

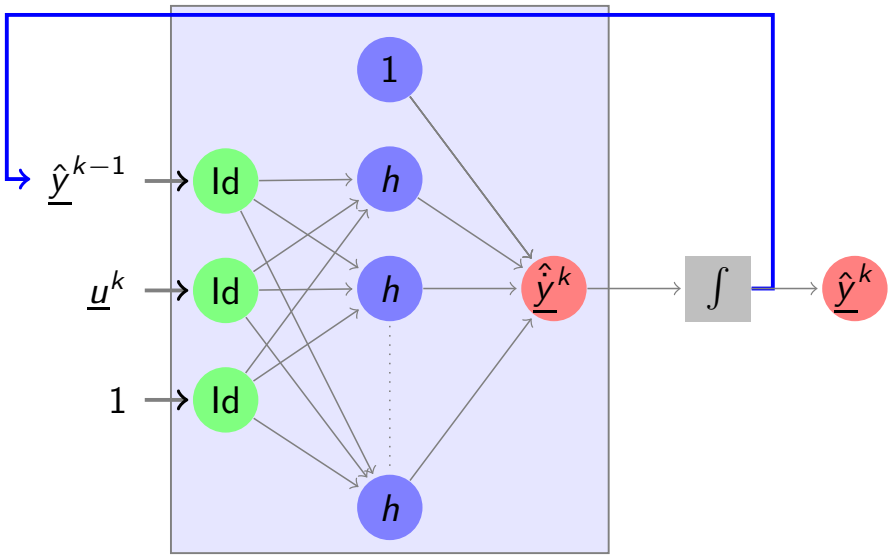
On peut approcher une fonction non linéaire f par un réseau à N neurones à sortie multidimensionnelle réelle $f_{\text{R.N.}} = (f_{1,\text{R.N.}}, ..., f_{n_y,\text{R.N.}})$:

$$f_{l,\text{R.N.}}(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{N} w_i^{(l)} h\left(\sum_{j=1}^{n_x} w_{ij} x_j + w_{i0}\right) + w_0^{(l)}$$

$h(s) = \frac{2}{1+exp(-2s)} - 1$



- Approximateur universel [Hornik *et al. 1989*]
- Modèle parcimonieux [Barron 1993]
- $N(N_x + N_y + 1) + N_y$ paramètres



$$\underline{x} = \begin{pmatrix} \hat{\underline{y}}^{k-1} \\ \underline{\hat{u}}^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_1^{k-1} \\ \vdots \\ \hat{y}_{n_y}^{k-1} \\ u_1^k \\ \vdots \\ u_{n_u}^k \end{pmatrix}$$

Récursivité des écritures

Le modèle

$$\underline{\hat{y}}^k = \underline{\hat{y}}^{k-1} + \Delta_k . \hat{f}(\underline{u}^{k-1}, \underline{\hat{y}}^{k-1}, \Delta_k ; \underline{w}) = \underline{y}^0 + \sum_{t=1}^{k} \Delta_t . \hat{f}(\underline{u}^{k-t}, \underline{\hat{y}}^{k-t}, \Delta_t ; \underline{w})$$

Le gradient de l'erreur d'apprentissage $e_n = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_y} \sum_{k=1}^{K_j} e_{k,i,j}$

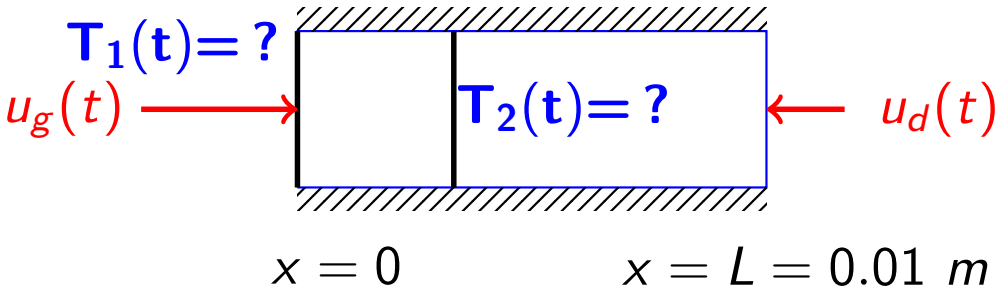
$$e_{k,i,j} = (\hat{y}_{j,i}^k - y_{j,i}^k)^2 = (\hat{y}_{j,i}^{k-1} + \Delta_k . \hat{f}(\underline{u}_i^{k-1}, \underline{\hat{y}}_i^{k-1}, \Delta_k ; \underline{w}) - y_{j,i}^k)^2$$

$$\Rightarrow \frac{de_{k,i,j}}{dw} \text{ fonction de } \frac{d\hat{y}_{j,i}^k}{dw} \text{ avec } \underline{\hat{y}}_i^{k-1} \text{ fixé}$$

mais aussi fonction de $\dfrac{d\underline{\hat{y}}^{k-1}}{dw}$ et donc aussi fonction de $\dfrac{d\underline{\hat{y}}_i^{k-2}}{dw}$ etc etc...

Coût calculatoire accru pour le problème d'optimisation !

Cas simplifié : l'équation de la chaleur en 1D (I)



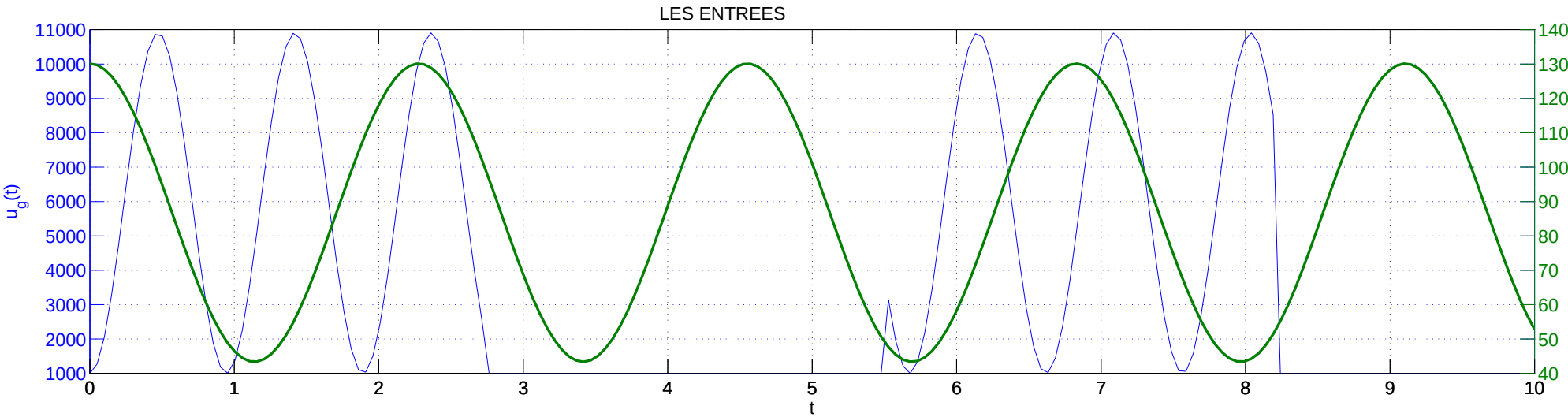
$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} - \alpha\left(x, T(x,t)\right)\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = 0, \ \forall (x,t) \in]0, L[\times]0, \tau[$$

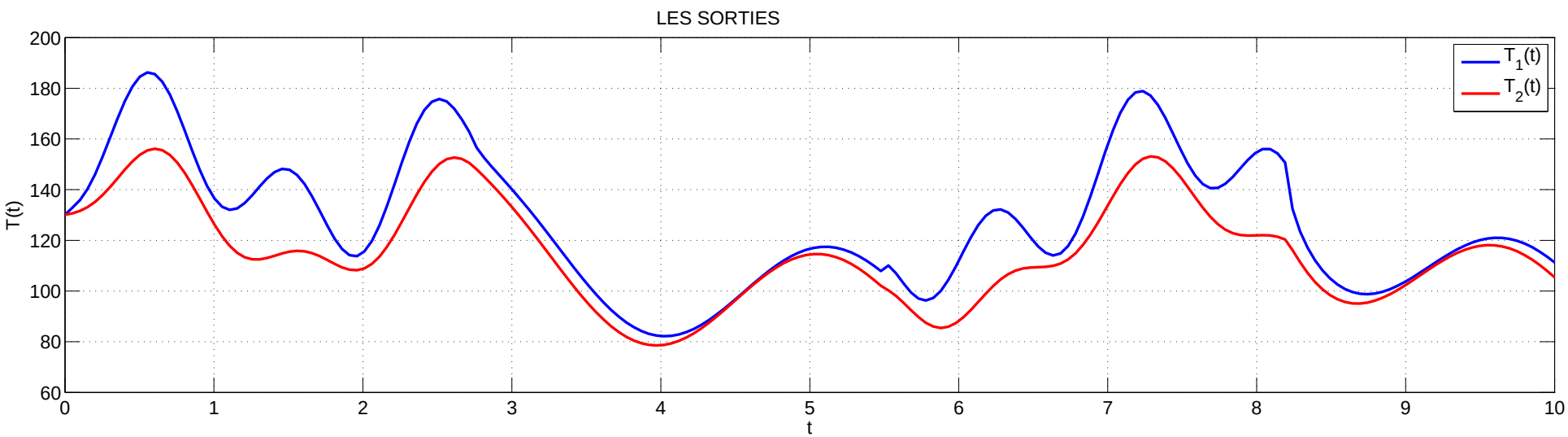
- $\tau = 10\ s$;
- $\alpha = 0.00001(1 - 0.9x/L)\ [m^2.s^{-1}]$ la diffusivité thermique du matériau ;
- C.I. : $\forall x \in [0, L],\ T(x,t)|_{t=0} = u_x(x) = u_x$;
- C.L. : $\forall t \in [0, \tau],\ \left.\frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = u_g(t)$;
- C.L. : $\forall t \in [0, \tau],\ T(x,t)|_{x=L} = u_d(t)$.

Problème

Modéliser les sorties $T_1(t)$ et $T_2(t)$, $t \in [0, \tau]$, en fonction des entrées $u_g(t)$, $u_d(t)$ et u_x.

Cas simplifié : l'équation de la chaleur en 1D (II)

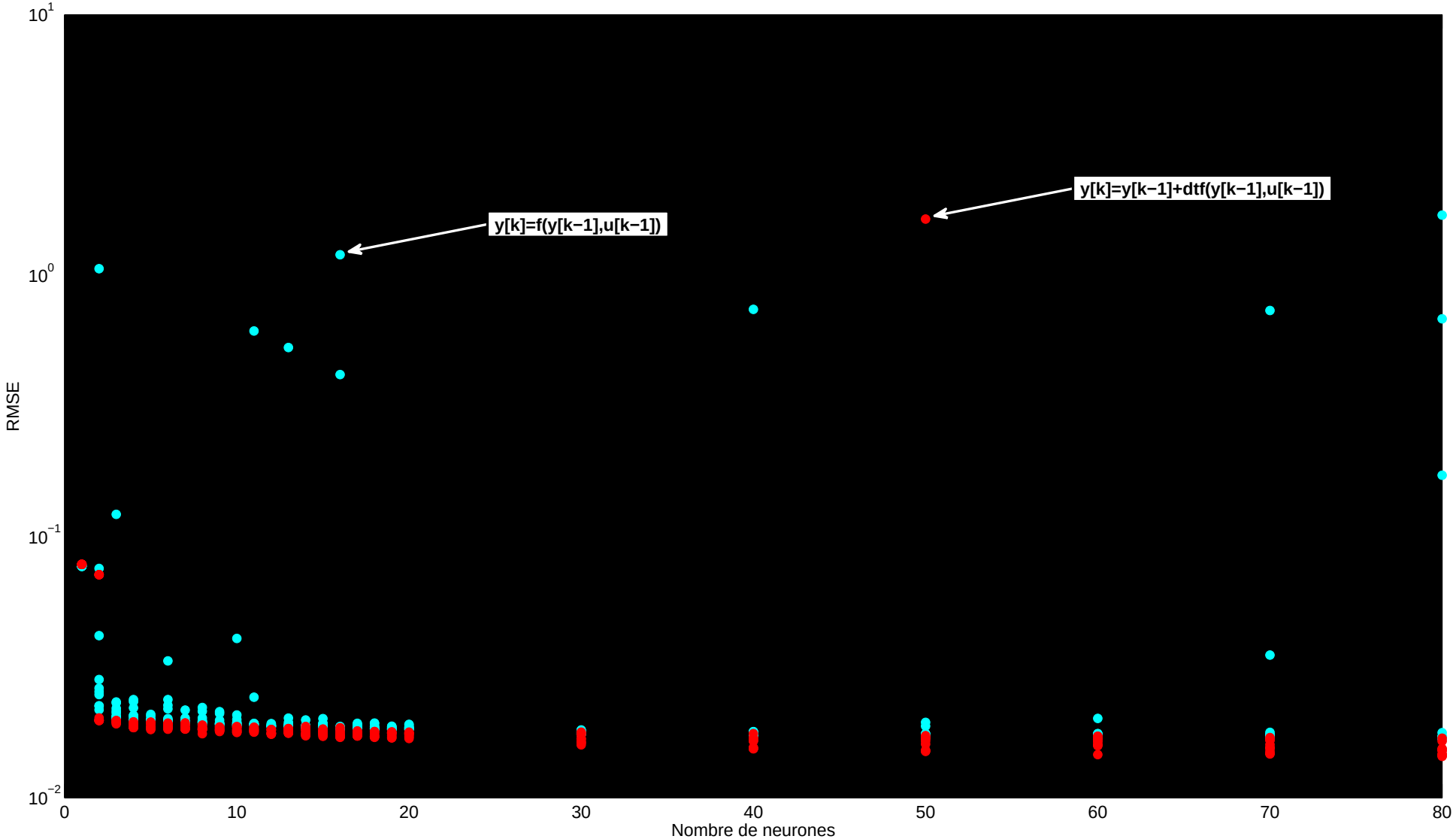




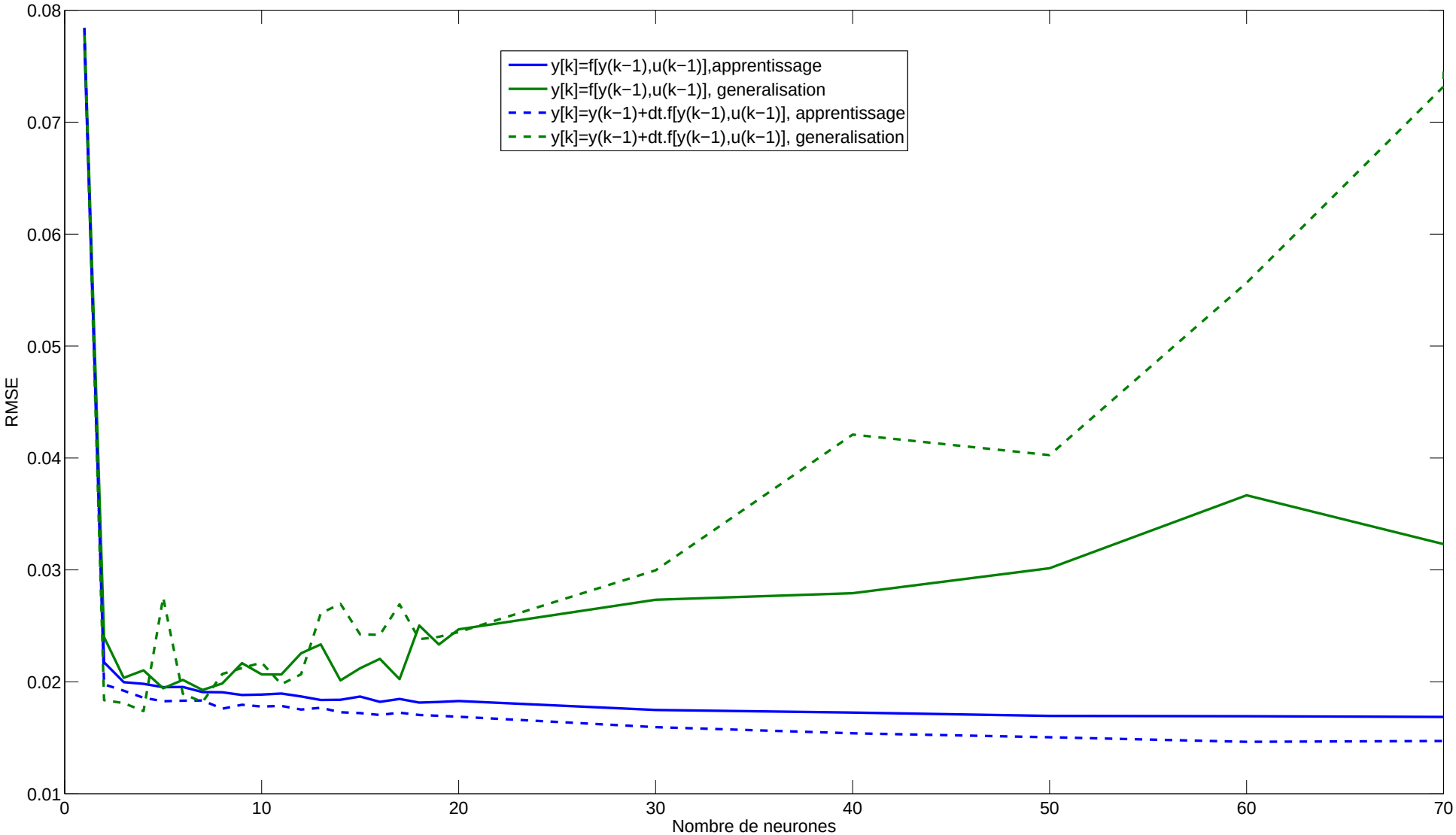
Cas simplifié : l'équation de la chaleur en 1D (III)

- Équation de la chaleur résolue par différences finies pour l'espace et Euler implicite pour le temps :
  - sous Matlab R2007a
  - 200 points équiespacés dans le temps
- Algorithme "Levenberg-Marquardt"
  $\rightarrow \underline{w}^{(iter)} = \underline{w}^{(iter-1)} - (\nabla_{\underline{w}} e_n^{(iter-1)\ t} \nabla_{\underline{w}} e_n^{(iter-1)} + \mu \mathbf{I})^{-1} \nabla_{\underline{w}} e_n^{(iter-1)}$
- 4 entrées (entrées u_g et u_d + sorties T_1 et T_2)
- 2 sorties (T_1 et T_2)
- 10 couples entrées-sorties en apprentissage
- 1000 couples entrées-sortie en "généralisation"
- Construction des modèles de substitution en Fortran 90

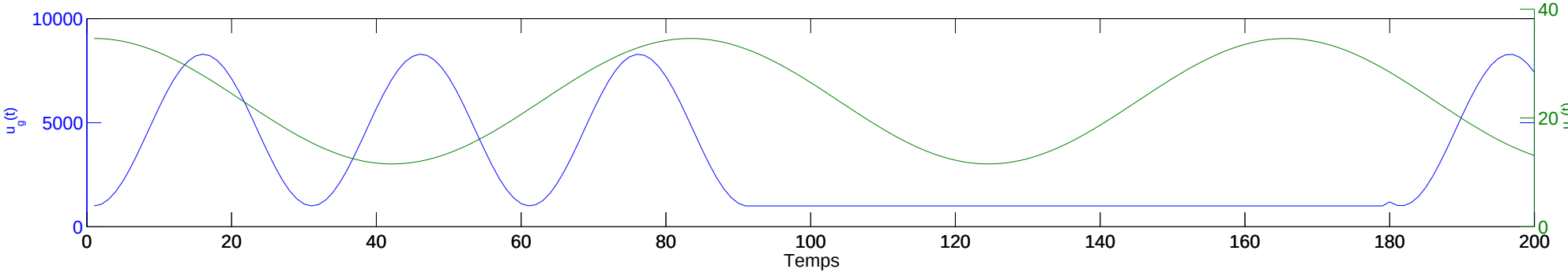
Résultats : erreur d'apprentissage avec 10 initialisations $\neq$



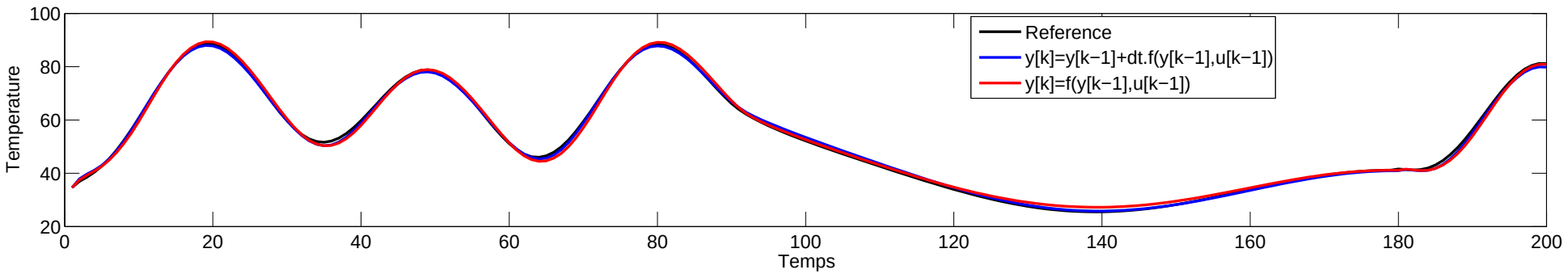
Résultats : erreur de généralisation



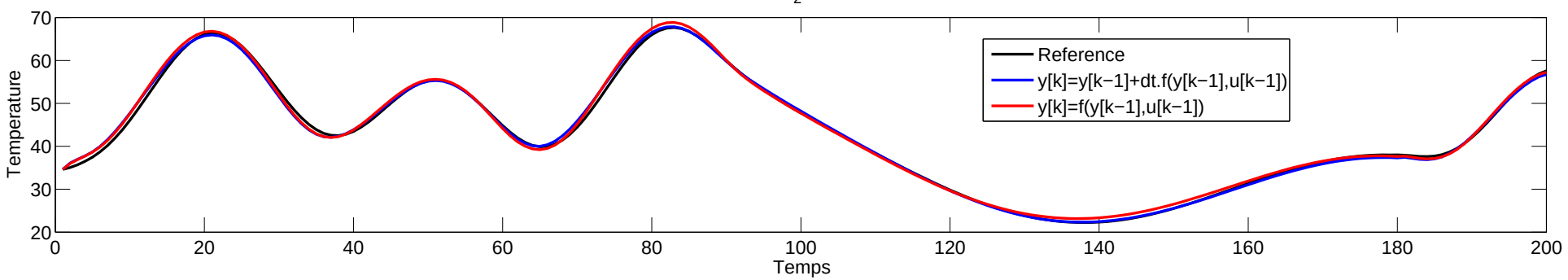
Résultats : généralisation I



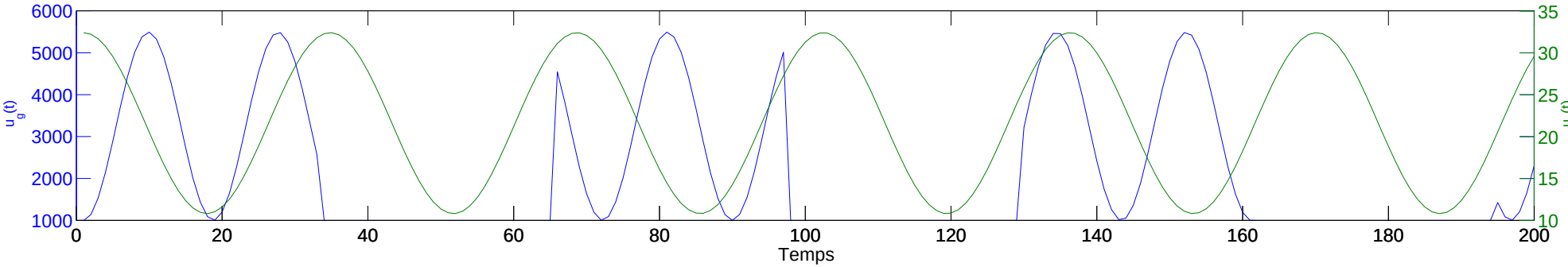
$T_1(t)$



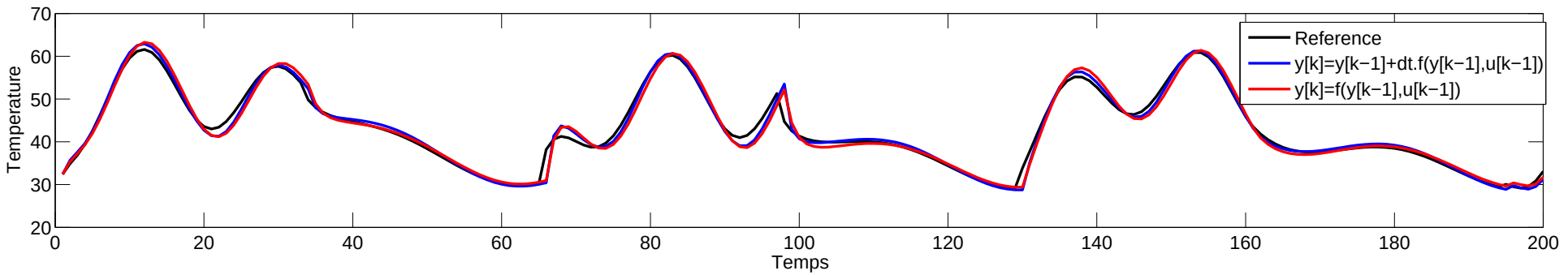
$T_2(t)$



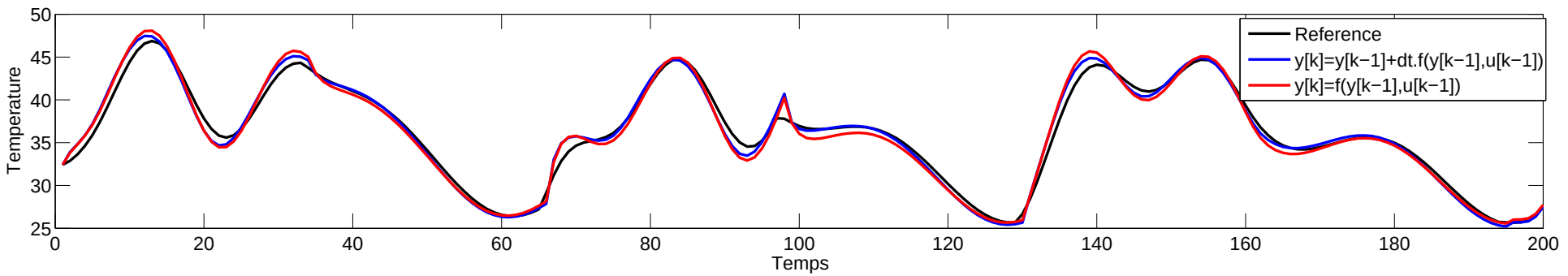
Résultats : généralisation II



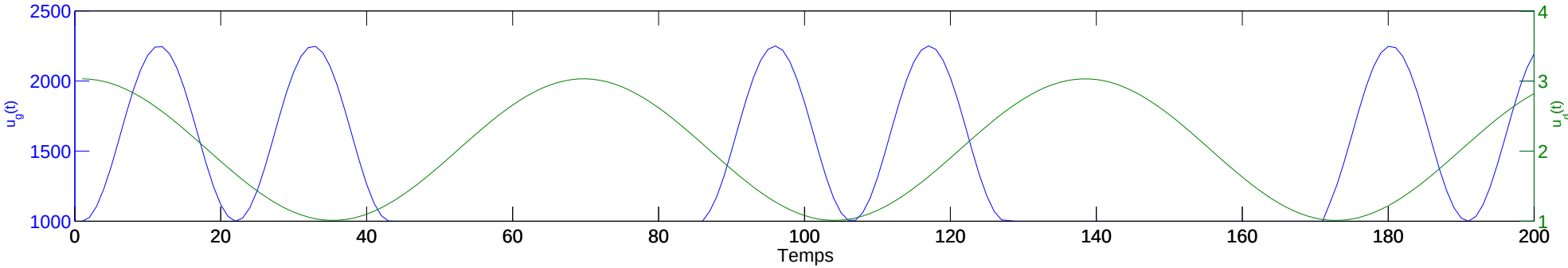
$T_1(t)$



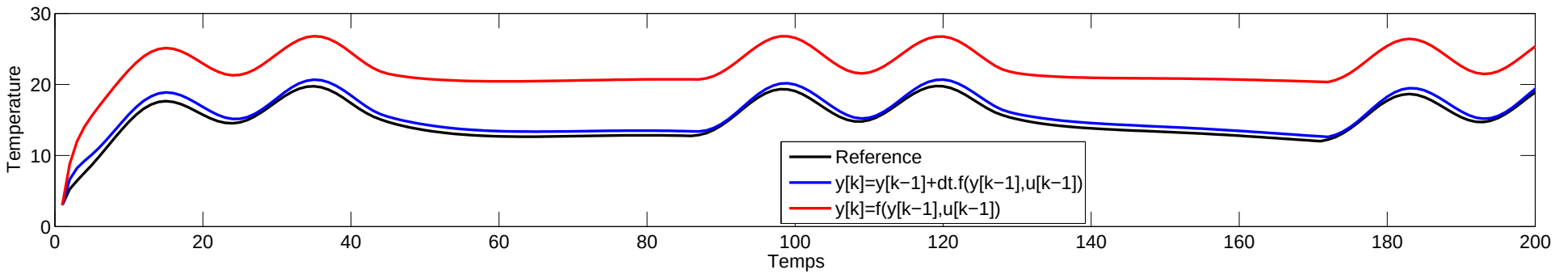
$T_2(t)$



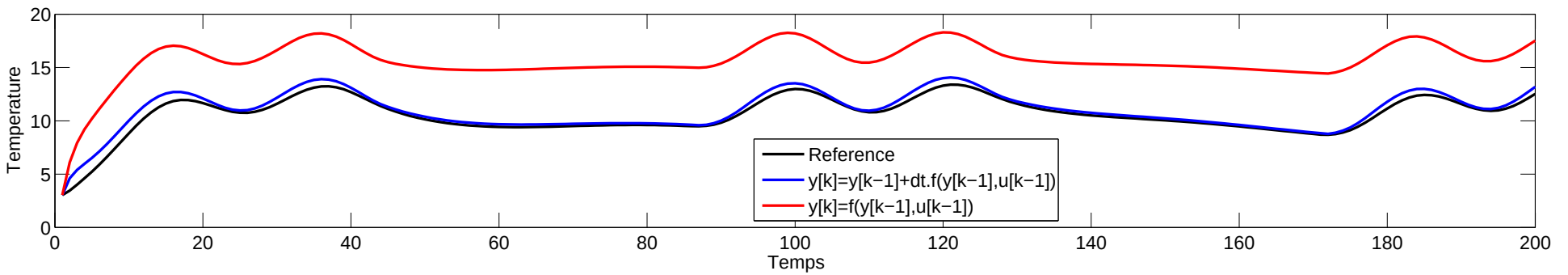
Résultats : généralisation III



$T_1(t)$



$T_2(t)$



Plan

Présentation du problème

Soit un n-échantillon $\mathcal{A} = ((X_1, Y_1), ..., (X_n, Y_n)) \in \Xi^n$ où $\Xi \subset \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$ et (X_i, Y_i) i.i.d. de loi P.

On considère le modèle de régression :

$$\mathbf{Y_i} = \mathbf{s(X_i)} + \varepsilon_\mathbf{i},\ \mathbf{i} \in \{\mathbf{1}, ..., \mathbf{n}\}$$

où $\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n$ sont i.i.d. tels que $\mathbb{E}[\varepsilon_i / X_i] = 0$ et $\mathbb{E}[\varepsilon_i^2 / X_i] = \sigma^2$.

On veut estimer s au moyen du n-échantillon et d'une collection de modèles $(S_m)_{m \in \mathcal{M}}$ de $\mathcal{S}$ à définir, où $\mathcal{M} = \{1, ..., \#\mathcal{M}\}$.

Ici, S_m est l'ensemble des réseaux à N_m neurones, $N_m : \mathcal{M} \mapsto \mathbb{N}^*$:

$$S_m = \left\{ f(x; \underline{w}) = \sum_{i=1}^{N_m} w_i h \left(\sum_{j=1}^{p} w_{ij} x_j + w_{i0} \right) + w_0 \right\},\ h(z) = \frac{2}{1 + \mathrm{e}^{-2z}} - 1$$

et $\mathcal{S}$ l'ensemble des réseaux de neurones.

Estimation de s dans S_m

- Le **contraste des moindres carrés** $\gamma : \mathcal{S} \times \Xi \to \mathbb{R}_+$

$$\gamma(t,(x,y)) = (y - t(x))^2 \text{ en régression homoscédastique}$$

- $\mathcal{R}(t) = \int_{\Xi}(y - t(x))^2 dP(x,y)$

On cherche un s_m dans S_m qui minimise $\mathcal{R}(t)$.
$\Rightarrow$ Nécessité de connaître P !

Alors...

...on prend un $\hat{s}_m$ dans un S_m qui minimise $\gamma_n(t,\mathcal{A})$:

$$\gamma_n(t,\mathcal{A}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - t(x_i))^2$$

Boîte à outils classique en sélection de modèles

Pour garantir une bonne erreur de généralisation, on choisit un modèle S_m "pas trop complexe" à l'aide de :

- la validation croisée *K-folds* (courant en réseau de neurones) ;
- une approche de type *hold-out* : choisir S_m dans lequel l'estimateur $\hat{s}_m$ est d'erreur minimale sur une base de test.
- de critères de sélection de type :
  - AIC $= -2 \ln \mathcal{L}(\underline{w}) + 2\#\underline{w}$;
  - BIC $= -2 \ln \mathcal{L}(\underline{w}) + 2\#\underline{w} \log(n)$.

Autre approche

Utiliser une méthode non asymptotique et peu gourmande.
$\rightarrow$ Quid de l'heuristique de pente et du saut de dimension ?

Sélection de modèles par critère pénalisé

Soit $(S_m)_{m\in\mathcal{M}}$ une collection de modèles.

- On a une collection $\hat{s}_1, ..., \hat{s}_{\#\mathcal{M}}$.
- **Modèle idéal $\mathbf{S_{m(s)}}$** :

$$S_m \text{ t.q. } S_m \ni \hat{s}_{m(s)} = \underset{\hat{s}_1,\ldots,\hat{s}_{\#\mathcal{M}}}{\operatorname{argmin}} \|\hat{s}_m - s\|_{2,P}^2$$

  $\hat{s}_{m(s)} \neq$ un estimateur de s car fonction de P inconnu.
  On l'appelle l'**Oracle**.
- **But :** Trouver un estimateur $\hat{s}_{\hat{m}}$ de s proche de l'Oracle à partir des $\hat{s}_1, ..., \hat{s}_{\#\mathcal{M}}$, de $\mathcal{A}$, de n et des propriétés des modèles $S_1, ..., S_{\#\mathcal{M}}$.
- **Moyen :** Critère pénalisé assurant un compromis biais-variance :

$$\hat{m} = \underset{m\in\mathcal{M}}{\operatorname{argmin}} \{\underbrace{\gamma_n(\hat{s}_m, \mathcal{A}) + \text{pen}(m)}_{\text{crit}(m)}\}$$

Choix de la pénalité

Minimiser $\text{crit}(m) = \gamma_n(\hat{s}_m, \mathcal{A}) + \text{pen}(m)$ revient à minimiser

$$\text{crit}(m) = \|\hat{s}_m - s\|_{2,P}^2 + \gamma_n(\hat{s}_m, \mathcal{A}) - \|\hat{s}_m - s\|_{2,P}^2 + \text{pen}(m) \underset{\text{Oracle}}{\overset{\heartsuit}{=}} \|\hat{s}_m - s\|_{2,P}^2$$

La pénalité idéale s'écrit alors $\text{pen}(m) = \|\hat{s}_m - s\|_{2,P}^2 - \gamma_n(\hat{s}_m, \mathcal{A})$ et est fonction de P inconnue.

Hypothèse : $\exists$ des résultats théoriques fournissant une pénalité optimale

$$\text{pen}_{\text{opt}}(m) = \kappa_{\text{opt}} \text{pen}_{\text{shape}}(m)$$

où κ_{opt} est une constante numérique **à déterminer**.

$\Rightarrow \text{pen}_{\text{shape}}(m) \approx \frac{N_m(p+1)}{n}$ dans le cadre des réseau de neurones [Barron, Birgé et Massart, 1995]

Calibration de κ_{opt} dans $\text{pen}_{\text{opt}}(m) = \kappa_{\text{opt}}\text{pen}_{\text{shape}}(m)$

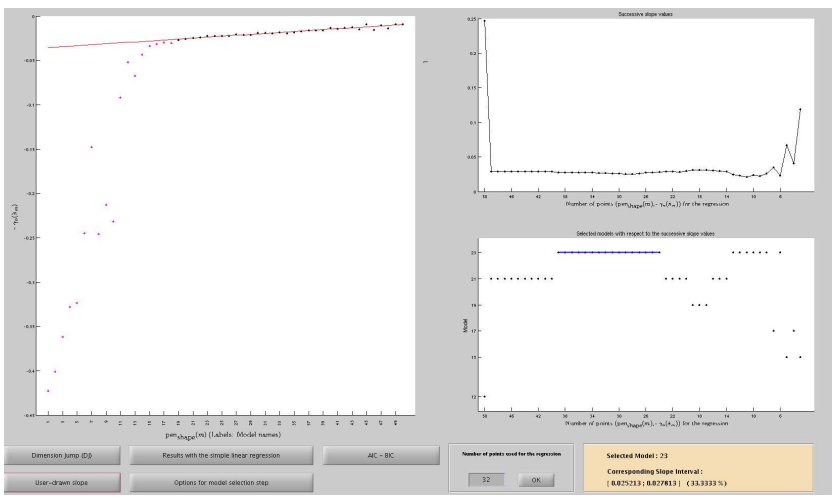
Heuristique de pente [Birgé et Massart, 2006] et saut de dimension [Arlot et Massart, 2009] implémentés dans `CAPUSHE` (`Matlab` et `R`) :

- J.-C. Baudry, C. Maugis et B. Michel, *Slope heuristics : overview and implementation*, Stat Comput, 2012

Data-driven slope estimation (DDSE)

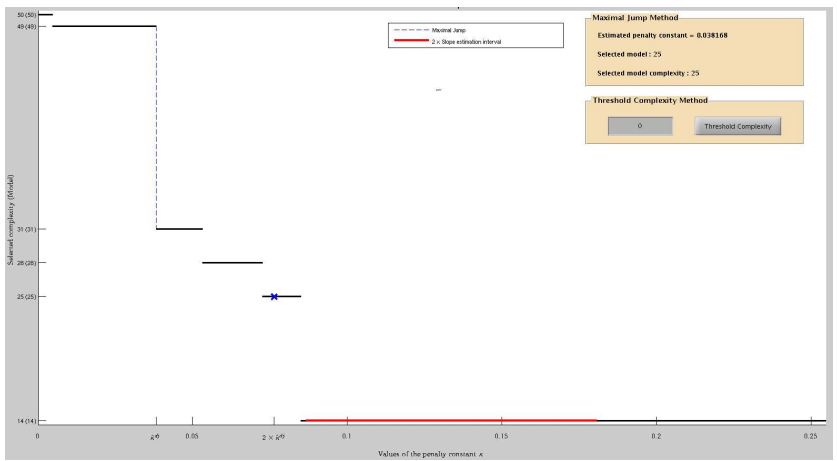
Pour des modèles complexes, on a :

$$-\gamma_n(\hat{s}_m, \mathcal{A}) \approx \frac{\kappa_{\text{opt}}}{2}\text{pen}_{\text{shape}}(m) + \beta$$



Dimension Jump (DJUMP)

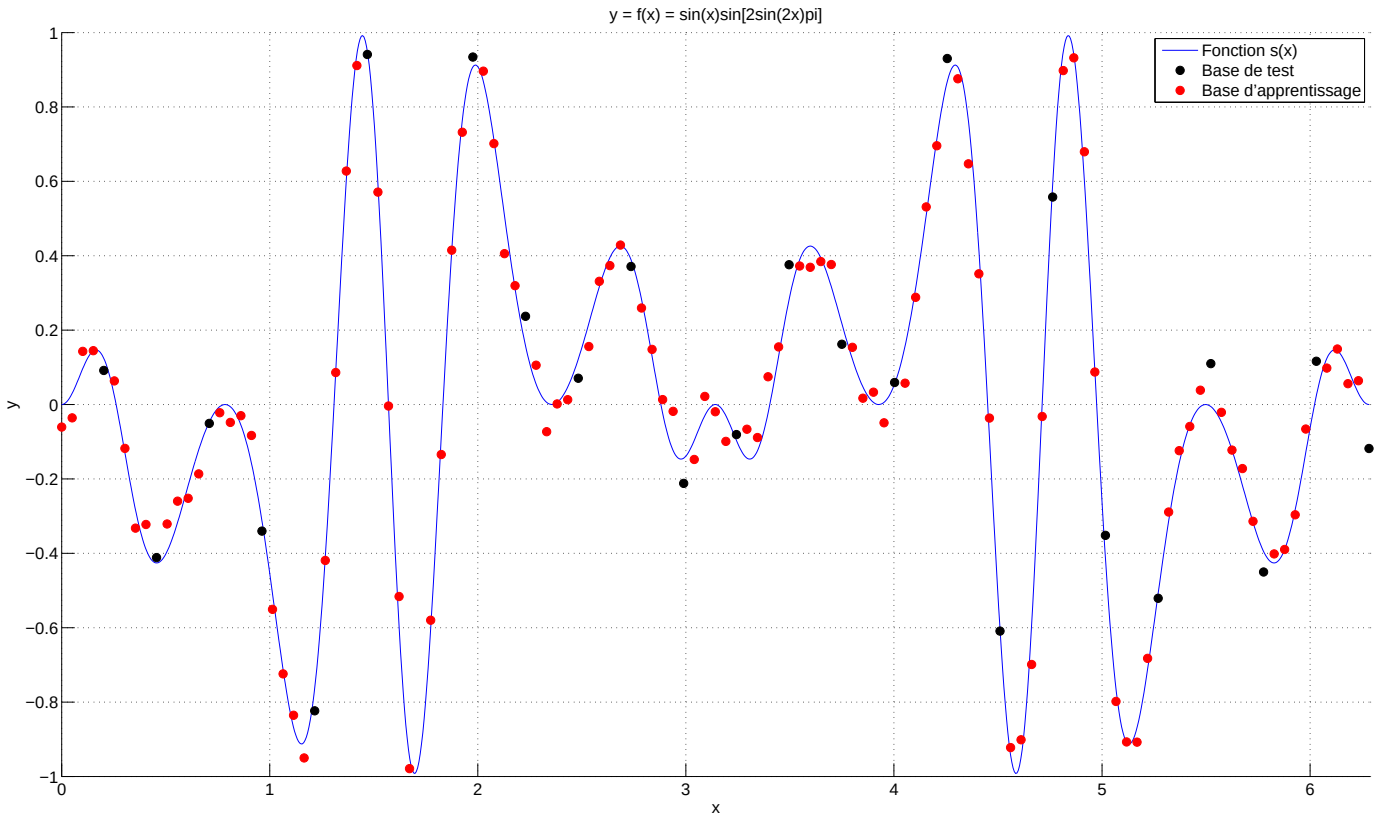
1. chercher κ entraînant le plus grand saut de dimension, de complexité ;
2. prendre $\kappa_{\text{opt}} = 2\kappa$.



Cas d'étude

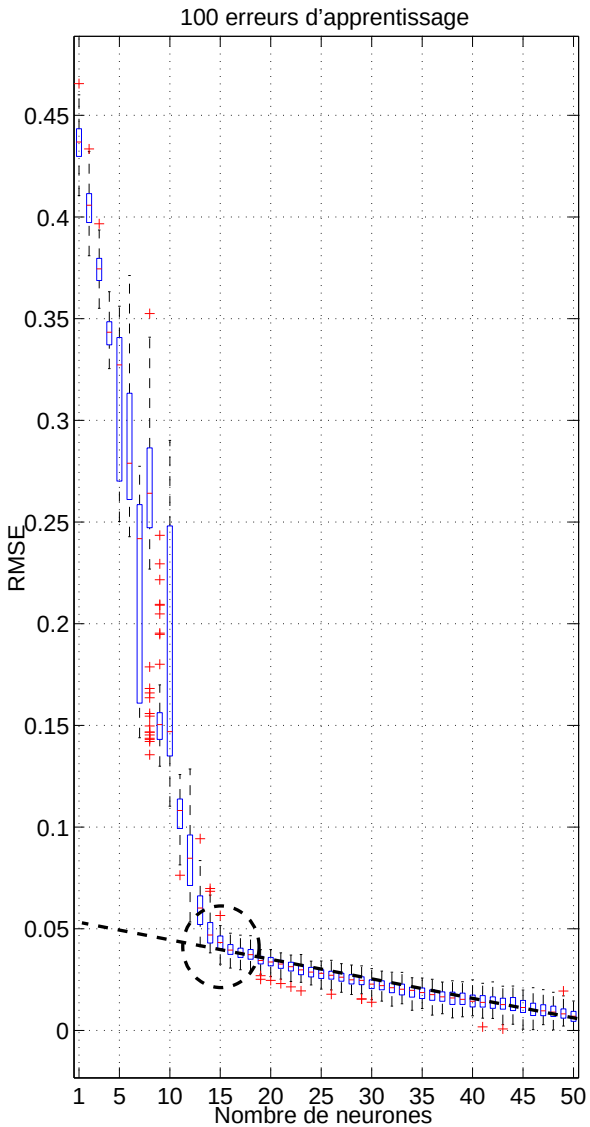
$$Y_i = s(X_i) + \varepsilon_i = \sin(X_i)\sin(2\pi\sin(2X_i)) + \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$$

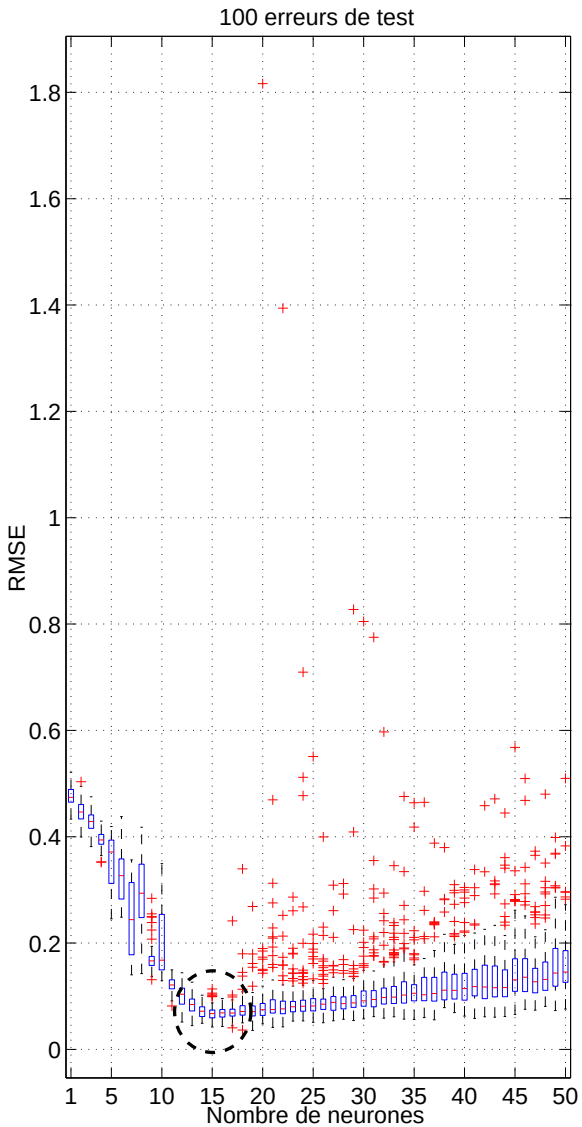
$$X_i = 2(i-1)\pi/(n-1),\ \ i \in \{1, ..., n\} \text{ avec } n = 100,\ \ \sigma = 0.05$$

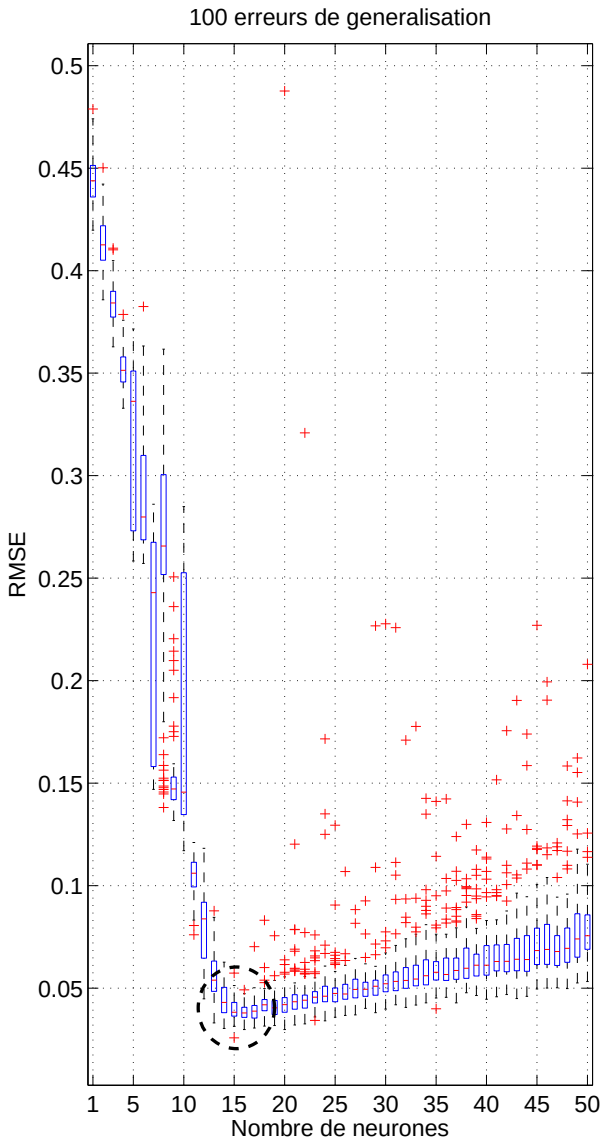


$\rightarrow$ Utilisation de 100 jeux de données $\mathcal{A} = (X_i, Y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}}$

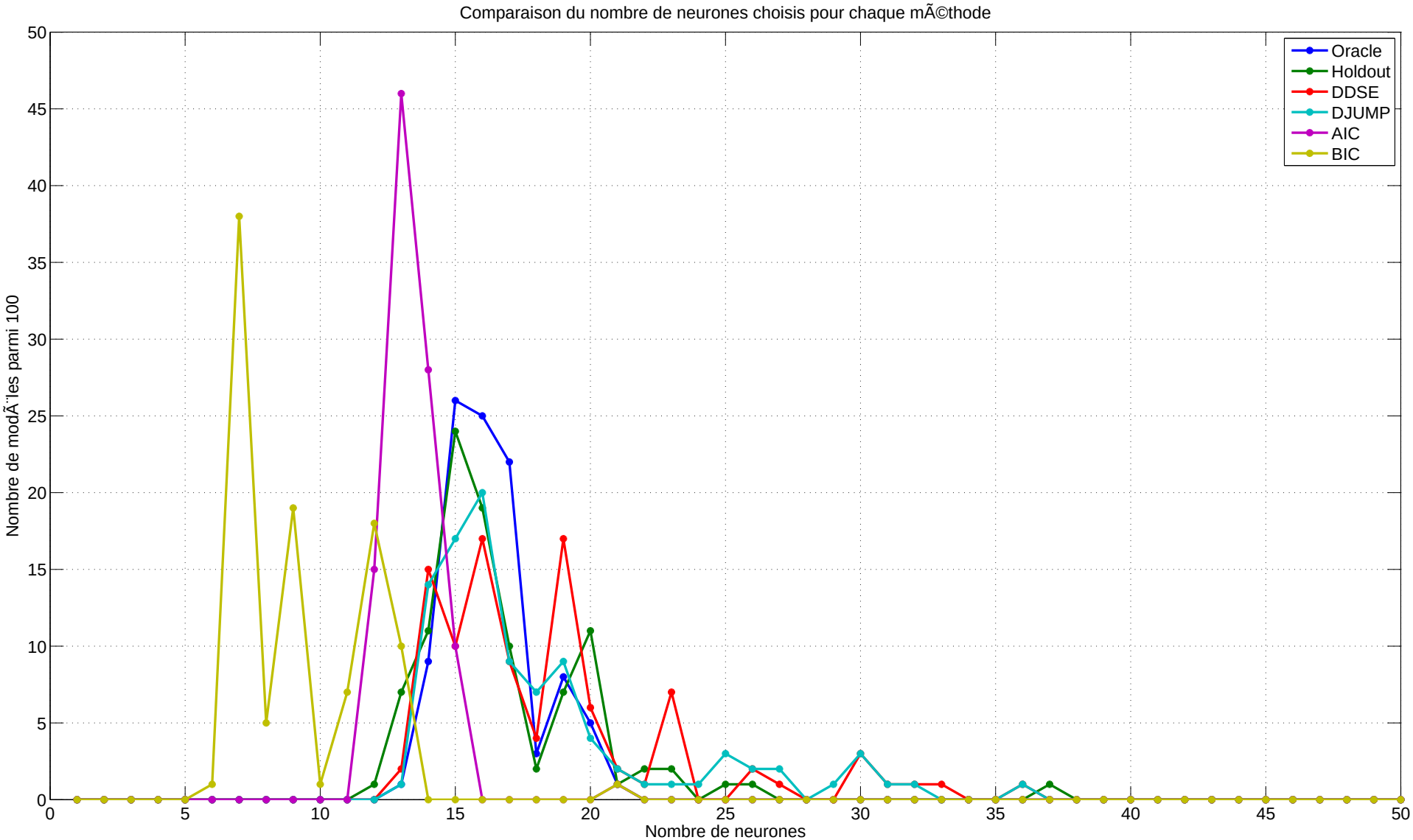
Variabilité de la base d'apprentissage $\mathcal{A} = (X_i, Y_i)_{i \in \{1.....n\}}$



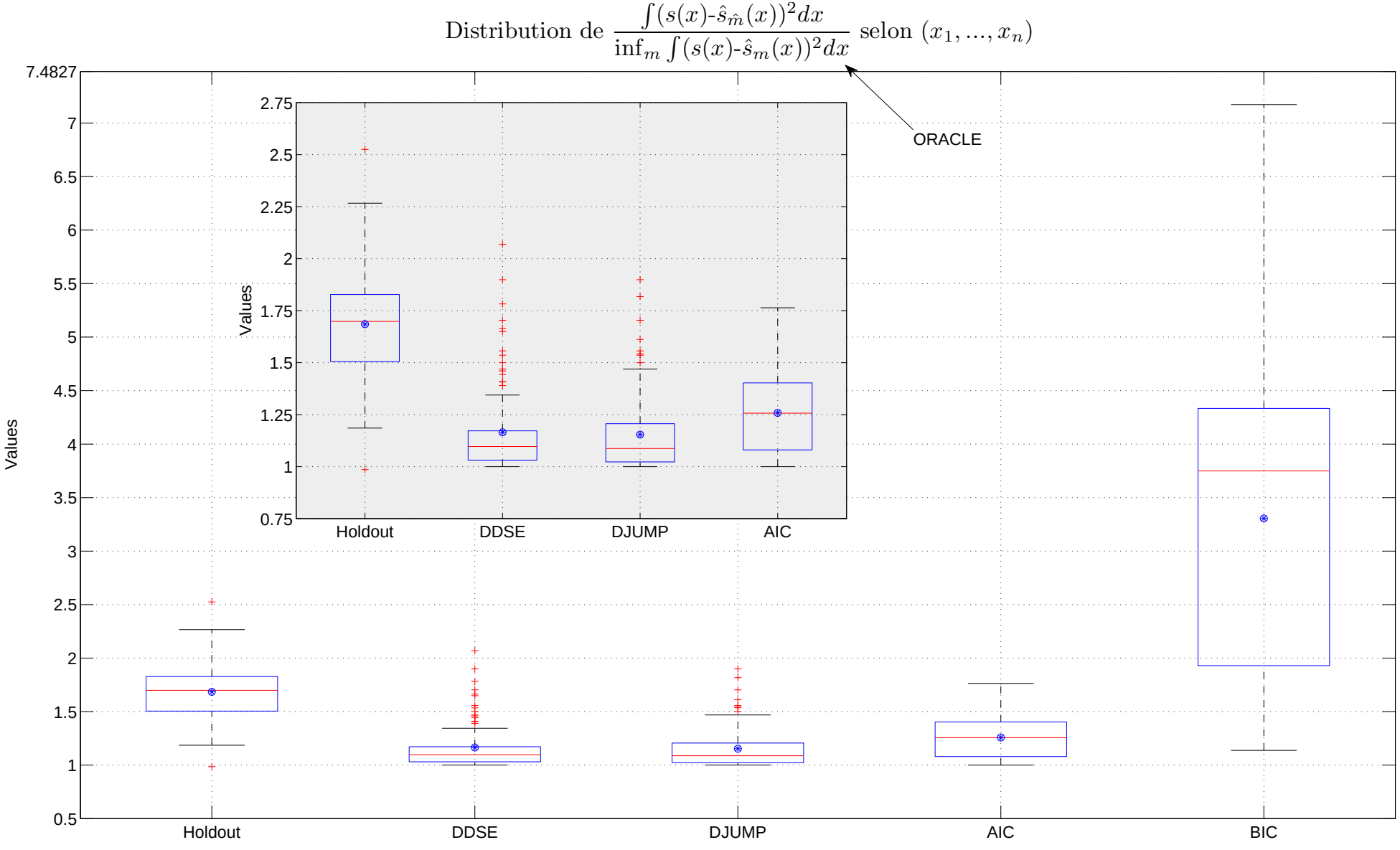




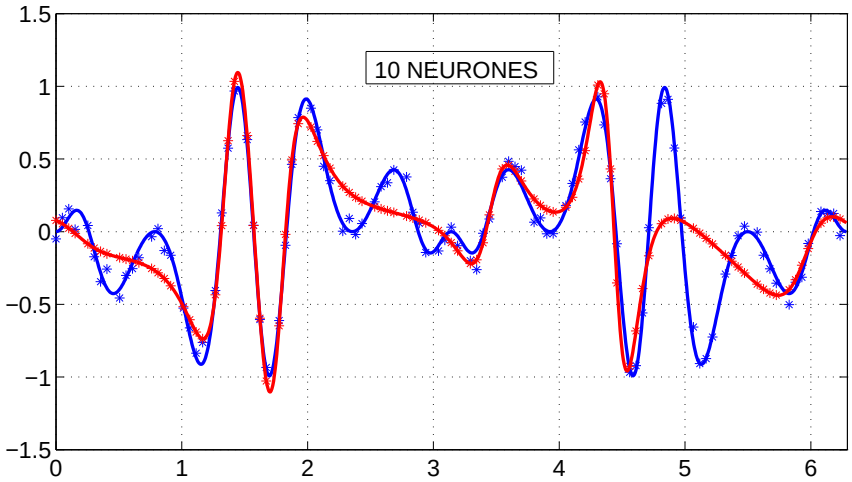
Fréquence de sélections de modèles pour 100 *n*-échantillons

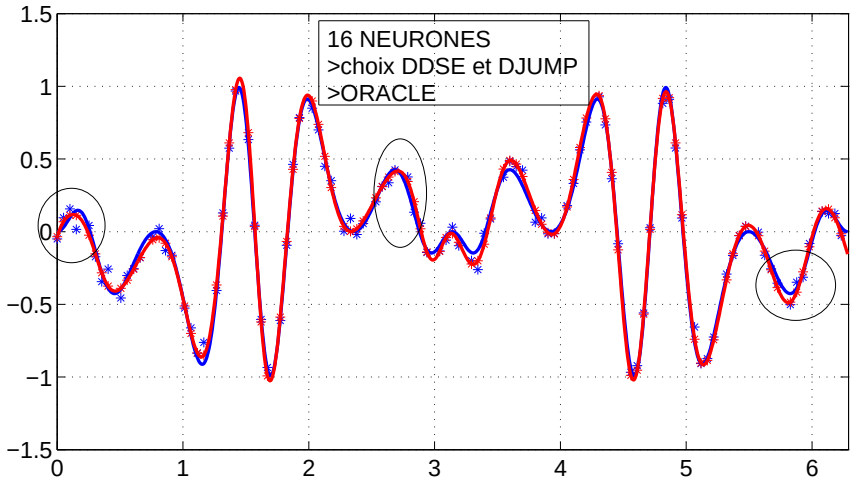


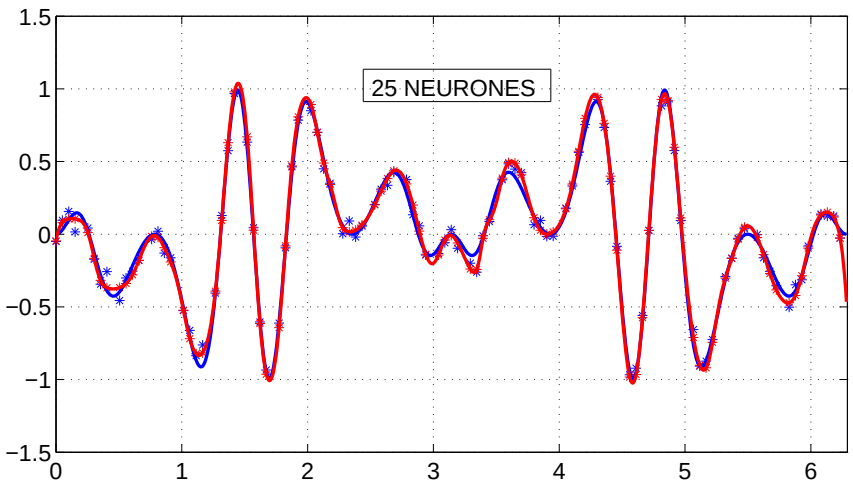
Distribution des distances à l'Oracle

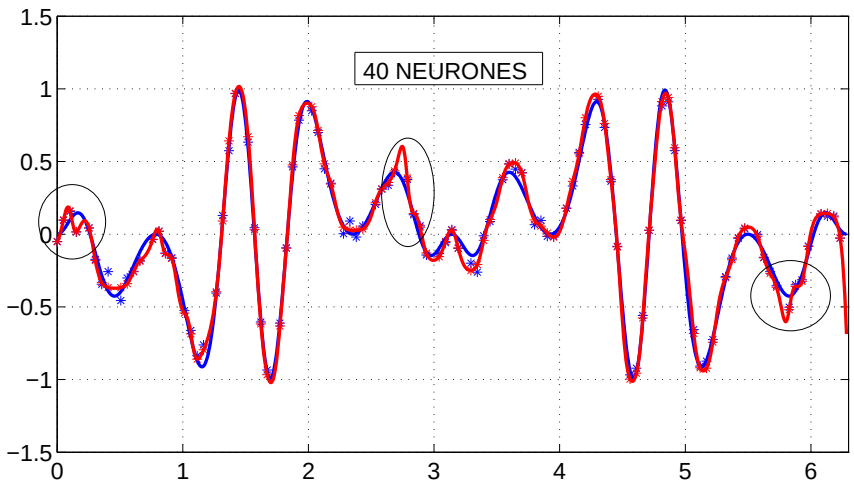


Qualité de prédiction et distance à l'Oracle

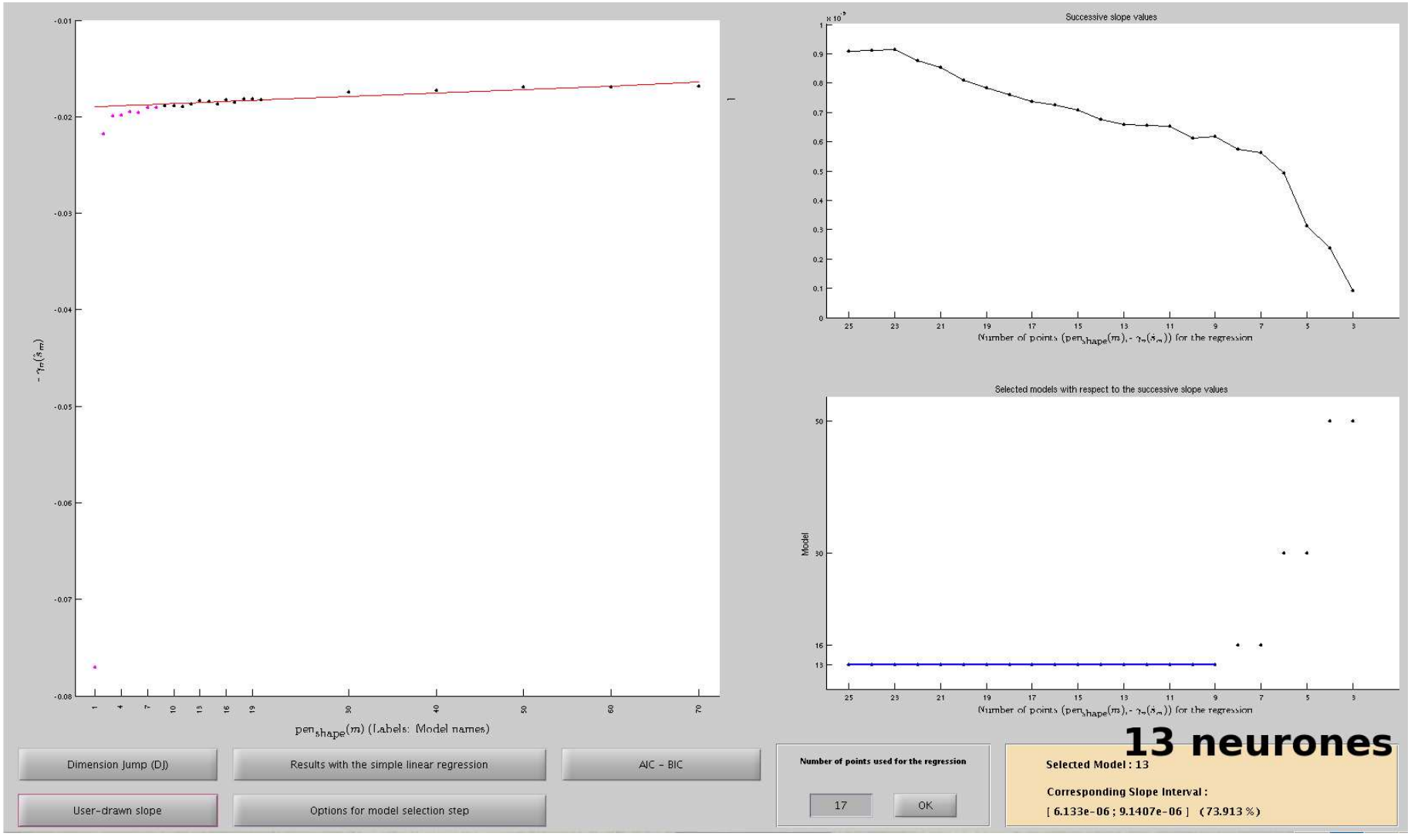




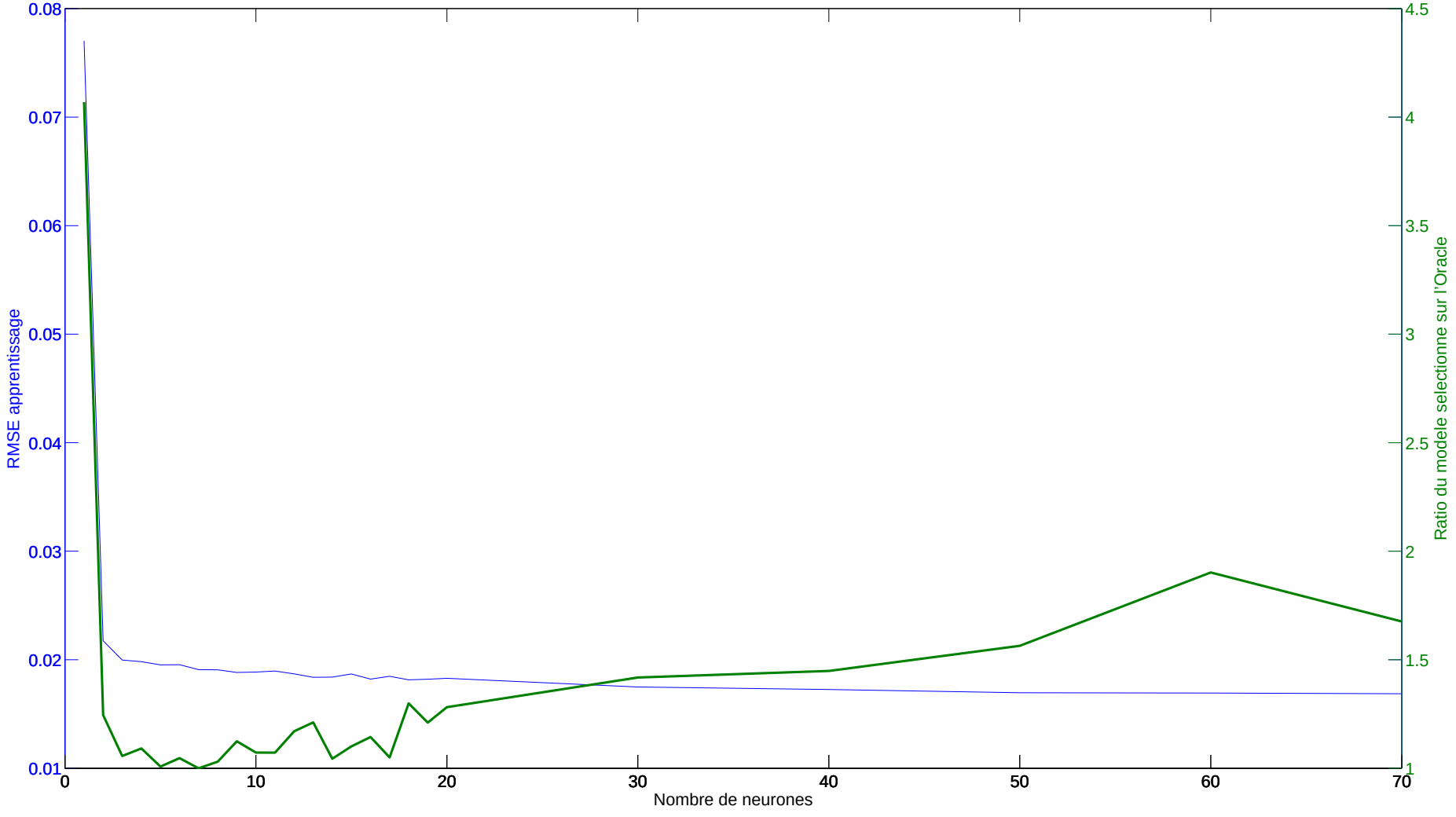




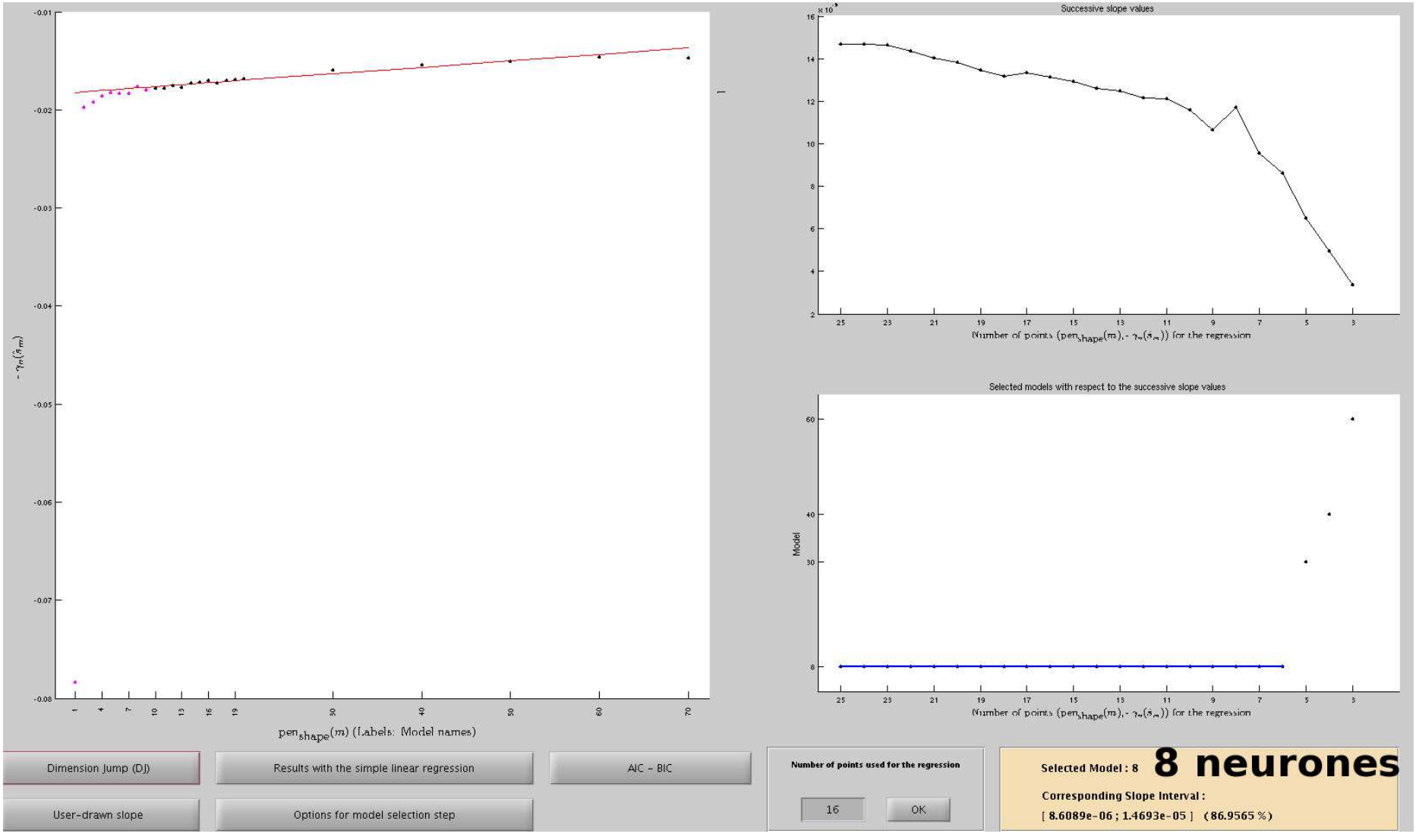
Équation de la chaleur $\underline{\hat{y}}_k = f_{\text{R.N.}}(\underline{u}_{k-1}, \underline{\hat{y}}_k)$



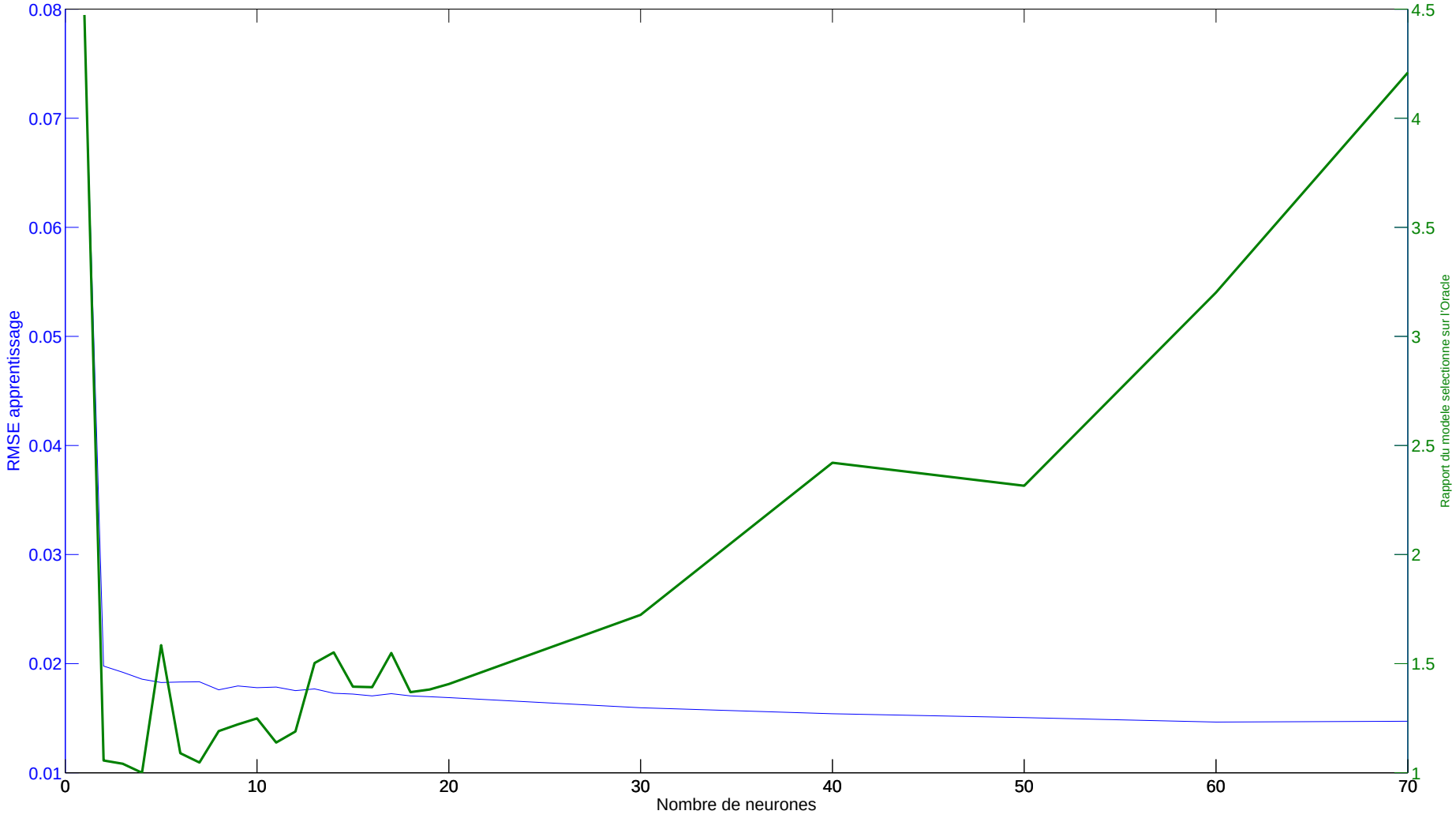
Équation de la chaleur $\hat{y}_{\nu} = f_{\mathrm{R.N.}}(\underline{u}_{k-1}, \hat{y}_{\nu})$



Équation de la chaleur $\underline{\hat{y}}_k = \underline{\hat{y}}_{k-1} + \Delta_k . f_{\text{R.N.}}(\underline{u}_{k-1}, \underline{\hat{y}}_{k-1})$



Équation de la chaleur $\hat{y}_k = \hat{y}_{k-1} + \Delta_k . f_{\text{R.N.}}(\underline{u}_{k-1}, \hat{y}_{k-1})$



Apprentissage de dynamiques spatio-temporelles par réseaux de neurones artificiels

MERCI !

Journées Mascot Num 2012 - Mercredi 21 mars 2012