

Parameter control in the presence of uncertainties

Victor Trappler

Supervisors: Élise Arnaud, Laurent Debreu, Arthur Vidard

June 15, 2018

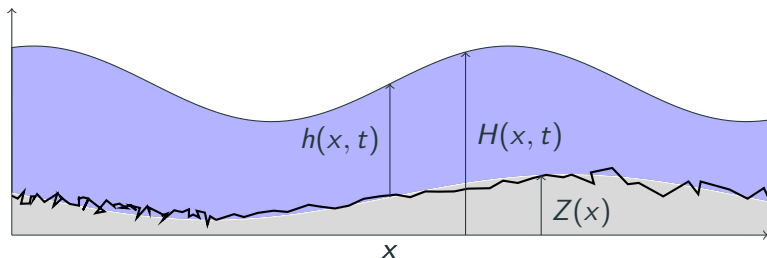
AIRSEA Research team (Inria)– Laboratoire Jean Kuntzmann



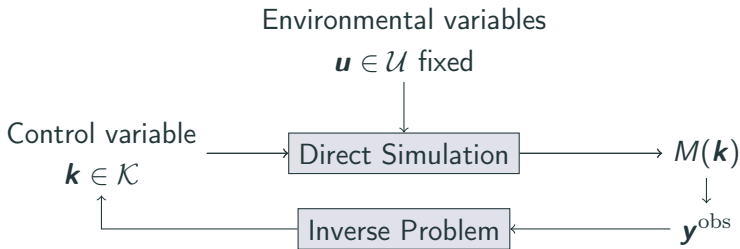
LABORATOIRE
JEAN KUNTZMANN
MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES - INFORMATIQUE

Friction de fond

- Friction du fond a une influence sur la circulation de l'eau en surgace
- Dépend de la taille caractéristique des aspérités
- Phénomène sous-maille



Modèle numérique: Shallow Water Equations



Expériences jumelles: On choisit \mathbf{k}_{ref}

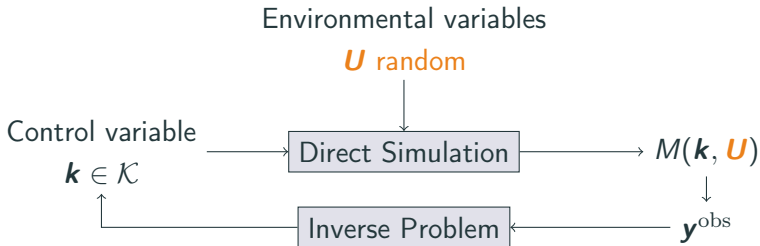
On a donc $\mathbf{y}^{\text{obs}} = M(\mathbf{k}_{\text{ref}})$

- Fonction coût: $J(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \|M(\mathbf{k}) - \mathbf{y}^{\text{obs}}\|^2 + \text{Régul. éventuelle}$
- Estimateur : $\hat{\mathbf{k}} = \arg \min_{\mathbf{k} \in \mathcal{K}} J(\mathbf{k})$

Incertitudes dans un code déterministe

\mathbf{U} est maintenant une variable aléatoire (densité $\pi(\mathbf{u})$)

\mathbf{y}^{obs} a été générée avec \mathbf{u}_{ref} , échantillon de \mathbf{U}



- $M(\mathbf{k})$ devient $M(\mathbf{k}, \mathbf{u})$ (\mathbf{u} est une entrée du modèle)
- Fonction coût: $J(\mathbf{k}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \|M(\mathbf{k}, \mathbf{u}) - \mathbf{y}^{\text{obs}}\|^2 + \text{Régul}$

Estimateur robuste ?

On veut pouvoir trouver une valeur $\hat{\mathbf{k}}$, tel que $M(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{U})$ soit relativement semblable à \mathbf{y}^{obs}

Idéalement, $M(\hat{\mathbf{k}}, \cdot)$

- reste assez performant pour fournir des prédictions acceptables
- ne varie pas trop avec \mathbf{U}

Approche variationnelle ou Bayésienne ?

- **Variationnelle:** Variable aléatoire indexée par \mathbf{k} :
 $\mathbf{k} \mapsto J(\mathbf{k}, \mathbf{U})$,
Extrema des moments ? $\mathbb{E}[J(\mathbf{K}, \mathbf{U}) | \mathbf{K} = \mathbf{k}] \dots$
- **Bayésienne:** $e^{-J(\mathbf{k}, \mathbf{u})} \propto p(\mathbf{y}^{\text{obs}} | \mathbf{k}, \mathbf{u}) = \text{Vraisemblance}$
Inférence bayésienne, marginalisation, Estimation bayésienne

Mais

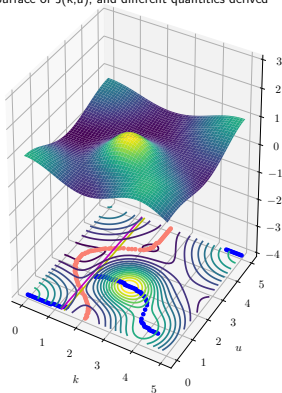
- Estimer efficacement moments ?
- Quelle connaissance de \mathbf{U} ?
- Gérer le coût de calcul du modèle

Différents critères

- Optimum global: $\min_{(\mathbf{k}, \mathbf{u})} J(\mathbf{k}, \mathbf{u}) \longrightarrow \text{EGO}$
 - Pire des cas: $\min_{\mathbf{k}} \max_{\mathbf{u}} J(\mathbf{k}, \mathbf{u}) \longrightarrow \text{Explorative EGO}$
 - M-robustesse: $\min_{\mathbf{k}} \mathbb{E}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U})] \longrightarrow \text{iterated LHS}$
 - V-robustesse: $\min_{\mathbf{k}} \mathbb{V}\text{ar}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U})] \longrightarrow \text{gradient-descent with PCE}$
 - ρ -robustesse: $\min \rho(J(\mathbf{k}, \mathbf{U})) \longrightarrow \text{gradient-descent with PCE}$
 - Multiobjectifs: estimer le front de Pareto \longrightarrow 1L/2L kriging
 - Minimiser probabilité de défaillance: $\min_{\mathbf{k}} \mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) > T]$
 - $\mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) \leq \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})] = \mathbb{P}[\mathbf{k} = \arg \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})]$
 \rightarrow Distribution et mode de $\arg \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})$: **MPE**
 - Relaxation de la contrainte:
 $R_{\alpha}(\mathbf{k}) = \mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) \leq \alpha \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})]$
- $\left. \begin{array}{l} \text{• Optimum global: } \min_{(\mathbf{k}, \mathbf{u})} J(\mathbf{k}, \mathbf{u}) \longrightarrow \text{EGO} \\ \text{• Pire des cas: } \min_{\mathbf{k}} \max_{\mathbf{u}} J(\mathbf{k}, \mathbf{u}) \longrightarrow \text{Explorative EGO} \end{array} \right\} \pi(\mathbf{u}) ?$
- $\left. \begin{array}{l} \text{• M-robustesse: } \min_{\mathbf{k}} \mathbb{E}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U})] \longrightarrow \text{iterated LHS} \\ \text{• V-robustesse: } \min_{\mathbf{k}} \mathbb{V}\text{ar}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U})] \longrightarrow \text{gradient-descent with PCE} \\ \text{• } \rho\text{-robustesse: } \min \rho(J(\mathbf{k}, \mathbf{U})) \longrightarrow \text{gradient-descent with PCE} \\ \text{• Multiobjectifs: estimer le front de Pareto } \longrightarrow \text{1L/2L kriging} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \mathbb{E}, \\ \mathbb{V}\text{ar} \end{array}$
- $\left. \begin{array}{l} \text{• Minimiser probabilité de défaillance: } \min_{\mathbf{k}} \mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) > T] \\ \text{• } \mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) \leq \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})] = \mathbb{P}[\mathbf{k} = \arg \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})] \\ \text{• Relaxation de la contrainte: } R_{\alpha}(\mathbf{k}) = \mathbb{P}[J(\mathbf{k}, \mathbf{U}) \leq \alpha \min_{\tilde{\mathbf{k}}} J(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{U})] \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Random} \\ \text{sets} \end{array}$

Illustration en 2D: $\mathcal{K} \times \mathcal{U} = [0; 5]^2$

Surface of $J(k,u)$, and different quantities derived



Marginal mean, worst case scenario, histogram of minimizers and variance

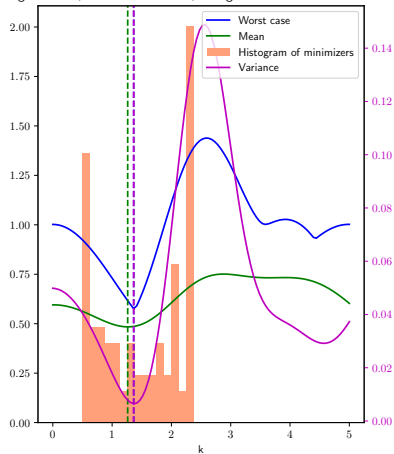
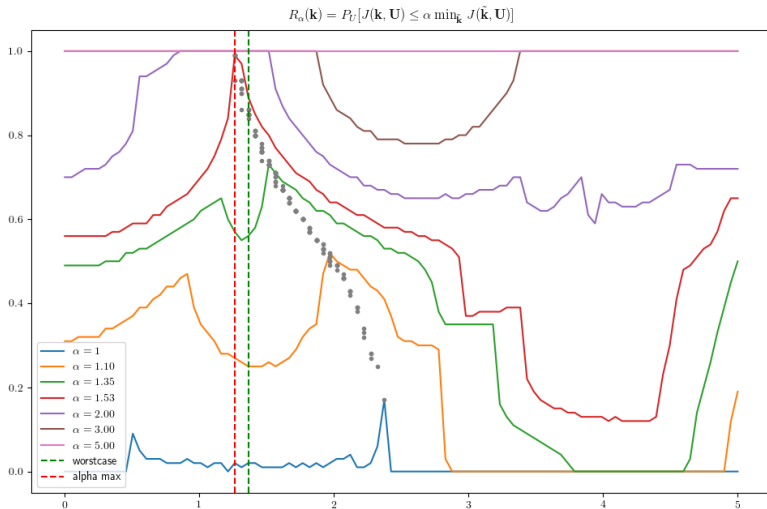
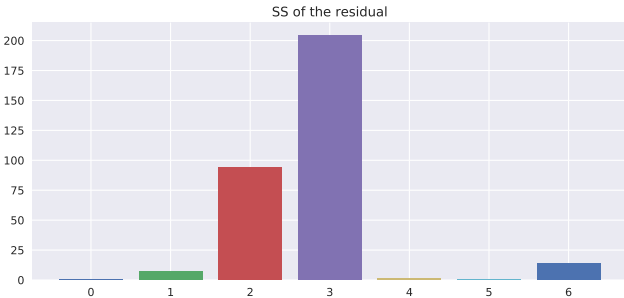
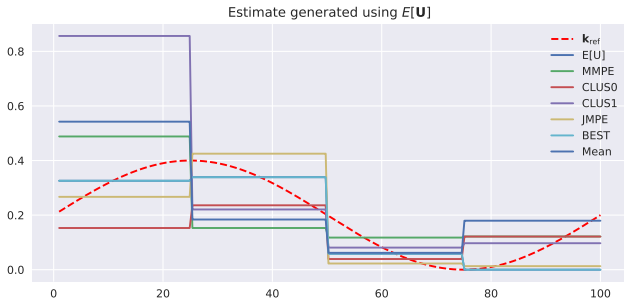


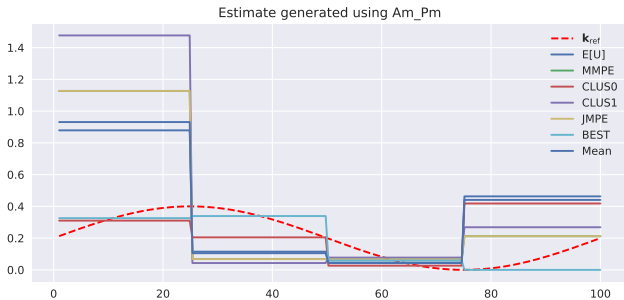
Illustration en 2D: relaxation de la contrainte avec α



MPE et cluster, u_{ref} centré



MPE et cluster, u_{ref} décalé



Théorème de Bayes

On définit la distribution a priori de $\mathbf{K} \sim \pi(\mathbf{k})$.

Distribution jointe de (\mathbf{K}, \mathbf{U}) ayant observé \mathbf{y}^{obs} : $p(\mathbf{k}, \mathbf{u} | \mathbf{y}^{\text{obs}})$?

Théorème de Bayes

$$\begin{aligned} p(\mathbf{k}, \mathbf{u} | \mathbf{y}^{\text{obs}}) &\propto p(\mathbf{y}^{\text{obs}} | \mathbf{k}, \mathbf{u}) \pi(\mathbf{k}, \mathbf{u}) \\ &\propto L(\mathbf{k}, \mathbf{u}; \mathbf{y}^{\text{obs}}) \pi(\mathbf{k}) \pi(\mathbf{u}) \end{aligned}$$

Lien avec J ? : Erreur quadratique \leftrightarrow Erreur gaussienne

$$L(\mathbf{k}, \mathbf{u}; \mathbf{y}^{\text{obs}}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \|M(\mathbf{k}, \mathbf{u}) - \mathbf{y}^{\text{obs}}\|_{\Sigma^{-1}}^2 \right] = \exp [-J(\mathbf{k}, \mathbf{u})]$$

Critères robustes Bayésiens

$$\text{ML : } \arg \max_{(\mathbf{k}, \mathbf{u})} L(\mathbf{k}, \mathbf{u}; \mathbf{y}^{\text{obs}})$$

$$\text{MAP : } \arg \max_{(\mathbf{k}, \mathbf{u})} p(\mathbf{k}, \mathbf{u} | \mathbf{y}^{\text{obs}}) = L(\mathbf{k}, \mathbf{u}; \mathbf{y}^{\text{obs}}) \pi(\mathbf{k}) \pi(\mathbf{u})$$

$$\text{MMAP : } \arg \max_{\mathbf{k}} p(\mathbf{k} | \mathbf{y}^{\text{obs}}) = \int_{\mathcal{U}} p(\mathbf{k}, \mathbf{u} | \mathbf{y}^{\text{obs}}) d\mathbf{u}$$

$$\text{Min variance : } \arg \min_{\mathbf{k}} \text{Var}_{\mathbf{U}} [p(\mathbf{k} | \mathbf{y}^{\text{obs}}, \mathbf{U})]$$

$$\text{Pire des cas : } \arg \max_{\mathbf{k}} \left\{ \min_{\mathbf{u}} p(\mathbf{k} | \mathbf{y}^{\text{obs}}, \mathbf{u}) \right\}$$

$$\text{MPE : } \underbrace{\text{Mode of } \mathbf{K}_{\arg \max} = \arg \max_{\mathbf{k}} p(\mathbf{k} | \mathbf{y}^{\text{obs}}, \mathbf{U})}_{\text{mieux} \rightarrow \text{Cluster analysis}}$$

Conclusion

Interrogations

- Fonction coût ou vraisemblance/postérieur ? “Mêmes” quantités, méthodes différentes pour les manipuler ?
- Quels critères sont vraiment pertinents ? liens entre eux ?
- À partir d'un ensemble de candidats: lequel choisir ?
- Quel budget d'évaluations en pratique ?

À faire

- Utilisation des métamodèles (sur quelles fonctions ?)
- Ensembles aléatoires pour probabilité de défaillance (voir avec Reda)
- y^{obs} ?