Planification d'expériences (numériques)

12-13 décembre 2017

Informations pratiques

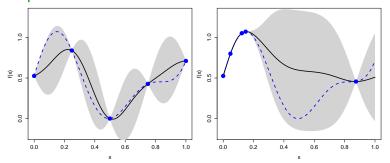
- Contact : Victor Picheny
 INRA (Institut National de la Recherche Agronomique)
 victor.picheny@inra.fr
- Volume horaire : 4,5 heures cours + 3h TP
- Support de cours : transparents uniquement
- Evaluation : exercice dans l'examen du 11 janvier + CR TP
- A noter : TP "filé" avec les autres cours de l'UP4

Propos du cours

Cours de O. Roustant : vous avez vu comment construire un métamodèle à partir d'un ensemble de données (x - y)

Question : comment choisir les points pour obtenir le "meilleur" modèle ?

Exemple de krigeage : même nombre de points mais différents emplacements



Quelques repères historiques

- Traditionnellement : pharmaceutique, agronomie, procédés...
- Depuis 20+ ans : expériences numériques

Planification d'expériences "classiques"

- Fisher : Design of Experiments (1935)
- Kiefer : Optimum experimental designs (1959)
- Fedorov : Theory of optimal experiments (1972)
- Taguchi : Introduction to quality engineering (1986)

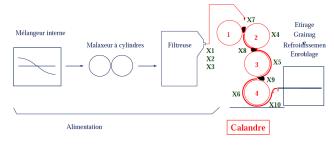
Planification d'expériences numériques

- McKay: Latin Hypercube Sampling (1979)
- Sacks : Design and analysis of computer experiments (1989)

Exemple introductif : qualité de feuilles de PVC

- X1 Température matière entrée calandre
- X2 Ouverture de la filière
- X3 Débit matière à l'entrée
- X4 Température cylindres 1 et 2
- X5 Température cylindre 3

- X6 Température cylindre 4
- X7 Diamètre du bourrelet 1
- X8 Diamètre du bourrelet 2
- X9 Diamètre du bourrelet 3
- X10 Dernier entrefer



Objectif : absence de bulles d'air, résistance

1 essai = 1 jour, 2500 €

- Un facteur à la fois
- Toutes les combinaisons possibles ⇒ plans pour facteurs qualitatifs
- "Un peu de tout" ⇒ plans remplissant l'espace

Ajout d'information a priori

"Toutes les variables contribuent linéairement à l'amélioration de la production"

- Modèle : $y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + ... + \beta_{10} X_{10} + \varepsilon$
- Comment obtenir le modèle le plus précis possible?
 - ⇒ plans optimaux / orientés modèle

Exemple PVC

Essayer toutes les combinaisons pour 2 valeurs de chaque X_i : 1024 essais = 3 ans

Planification: quels objectifs?

Obtenir le maximum d'information avec un nombre fixé d'observations

Analyse de sensibilité

Recherche des facteurs influents

Optimisation

Déterminer la meilleure combinaison de facteurs

Apprentissage / prédiction

Connaître le phénomène pour l'ensemble de variation des facteurs



- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$: facteur / entrée
- *d* : dimension du problème
- *y* : réponse / sortie
- Plan d'expériences : $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$

Dans la suite du cours : $b_i \le x_i \le B_i \quad \forall i$

- On normalise toujours! $0 \le x_i \le 1$
- Plan d'expériences = explorer l'hypercube de dimension d, $[0,1]^d$

Plan du cours

Partie 1 : approches géométriques

- 1. plans pour facteurs qualitatifs
- 2. plans remplissant l'espace

Partie 2 : plans orientés modèle

- 1. Modèle de régression linéaire
- 2. Modèle de krigeage

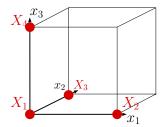
Plans pour facteurs qualitatifs

Un à la fois (OAT - "One-at-a-time")

Une approche intuitive pour voir si un facteur a une influence sur la réponse est de les faire varier un à la fois

- On fixe tous les autres facteurs à leur valeur de référence
- On effectue une expérience de référence, et une pour la variation de chaque facteur étudié

Exemple



point	<i>x</i> ₁	<i>x</i> ₂	<i>X</i> 3
X_1	0	0	0
X_2	1	0	0
<i>X</i> ₃	0	1	0
X_4	0	0	1

- + seulement d+1 observations
- + faciles à interpréter
- on ne peut voir que des effets linéaires

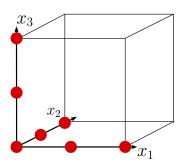
$$m(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

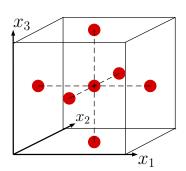
- seules 2 expériences servent à la fois pour estimer les effets
- pas de mesure des interactions

Exercice

Comment adapter ce type de plans pour estimer des effets quadratiques?

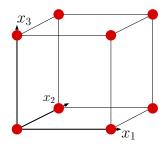
Solution Les effets quadratiques peuvent être estimés avec au choix :





On parle parfois de "plan en étoile".

Principe : considérer toutes les combinaisons de $x_i \in \{0,1\}$:



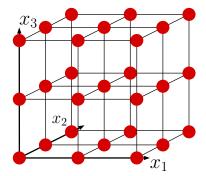
+ On peut mesurer toutes les interactions :

$$\beta_0 + \sum_k \beta_k x_k + \sum_{j,k} \beta_{j,k} x_j x_k + \beta_{1,2,3} x_1 x_2 x_3$$

 Le nombre d'expériences devient 2^d irréaliste avec d grand (cf. exemple PVC)

Plans factoriels complets

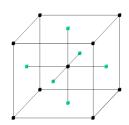
On peut également construire des plans factoriels avec k niveaux :



Cela permet de calculer des effets quadratiques (ou plus) mais le nombre d'évaluations k^d est encore moins réaliste...

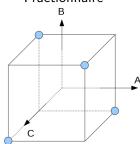
On peut aussi combiner ou réduire les plans

Composite



Effets quadratiques pour "seulement" $2^d + d + 1$ expériences

Fractionnaire



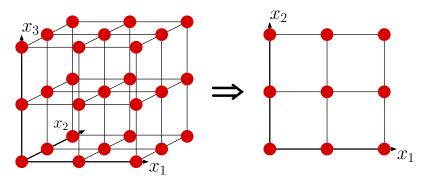
Effets linéaires avec 2^{d-1} expériences *mais* effets confondus : ici C = AB

Problème de projection

Pourquoi ne veut-on pas de superposition de points quand on projette?

Si une variable n'a pas d'influence (cf. cours à venir d'E.

Padonou), les observations deviennent redondantes :



On passe de 27 observations à 9...

Conclusion sur les plans pour facteurs qualitatifs pour :

Faciles à utiliser

Adaptés aux variables continues et discrètes

Peuvent être combinés (étoile + factoriel par exemple) ou dégradés (plans fractionnaires)

Bien adaptés (souvent optimaux) pour la régression linéaire

contre:

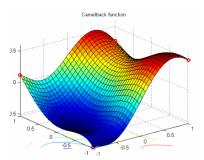
Nombre d'expériences non flexible Nombre d'expériences trop grand en grande dimension

Expériences dupliquées en projection

Notions géométriques : "remplir l'espace"

Quel contexte?

- Variables continues
- Pas d'information a priori sur la réponse (modèle statistique non présupposé)
- Réponse potentiellement complexe (voire discontinue)
- Possibilité de variables peu influentes
- Nombre de facteurs pouvant être élevé
- Nombre de facteurs influents pouvant être beaucoup plus petit



Objectifs

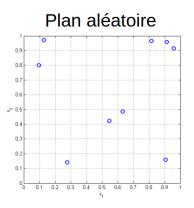
Les plans doivent :

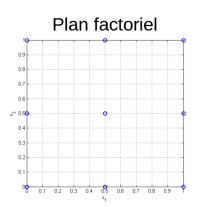
- permettre d'utiliser une grande variété de modèles
- donner de l'information pour n'importe quelle partie du domaine
- avoir de bonnes projections dans les sous-espaces
- être robustes à la montée en dimension

"Remplir l'espace" : explorer au maximum l'espace des variables

- observer f partout
- disperser au maximum les observations
- ⇒ quelle signification donner à "remplir", "partout", "disperser"?

Deux contre-exemples





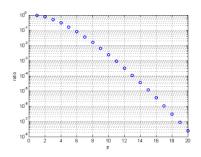
Curiosités de la montée en dimension (1/3)

L'intuition est souvent trompeuse!

- Volume du cube : $(2r)^d$
- Volume de la boule : $V = \frac{r^d \pi^d}{\Gamma(d/2+1)}$



Ratio hypersphère /hypercube :

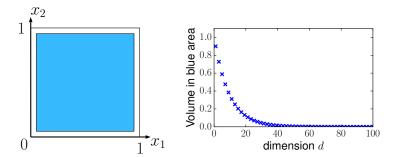


⇒ Pour d grand, la boule contient 0% du volume!

Curiosités de la montée en dimension (2/3)

Rapport entre le cube de côté 1 et celui de côté 0,9 :

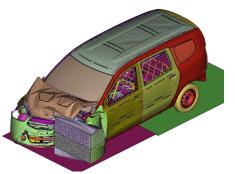
 $rac{V_1}{V_2}=0, 9^p
ightarrow 0 \Rightarrow$ Tout le volume est contenu dans l'"écorce"!



De plus : les points peuvent être loins les uns des autres Diagonale du cube unité de longueur \sqrt{d}

Curiosités de la montée en dimension (3/3)

■ Le nombre de sommets et d'arêtes d'un hypercube croît plus vite que ce qu'on peut penser



Tester toutes les combinaisons min / max des 50 facteurs prendrait...

Curiosités de la montée en dimension (3/3)

■ Le nombre de sommets et d'arêtes d'un hypercube croît plus vite que ce qu'on peut penser



Tester toutes les combinaisons min / max des 50 facteurs prendrait...

3000 fois l'âge de l'univers! $(d = 50 \rightarrow 2^d \approx 1.e15)$

Mesurer le remplissage d'espace

Trois familles de critère

- Intra-distances : au sein du plan d'expérience **X**_n
- Inter-distances : entre \mathbf{X}_n et \mathbb{X}
- Uniformité de la distribution des x_i

Intuition

- Les points sont bien dispersés s'ils sont éloignés les uns des autres
- On a "observé partout" si, pour tout point de X, il existe une observation x_i proche
- Le remplissage est uniforme si toutes les zones de l'espace contiennent un nombre égal d'observations

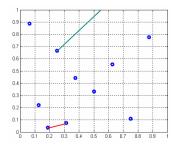
Critères basés sur les distances

Intra-distances: Maximin

la distance minimum entre les points du plan doit être grande

Inter-distances: Minimax

la distance maximale entre n'importe quel point du domaine et le point du plan le plus proche doit être petite



Exercice

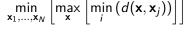
- 1. Formaliser les critères maximin et minimax
- 2. Ecrire les problèmes d'optimisation de plans d'expériences correspondants

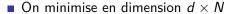
$$\max_{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N} \left[\min_{i \neq j} \left(d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right) \right]$$

- On maximise en dimension $d \times N$
- On calcule n(n-1)/2 distances.

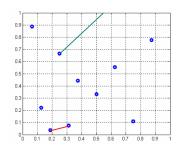
Minimax

$$\min_{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N} \left[\max_{\mathbf{x}} \left[\min_{i} \left(d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \right) \right] \right]$$



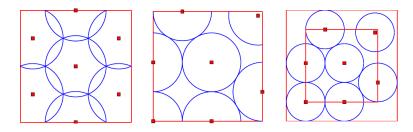


- On maximise en dimension d
- On calcule n distances



Lien avec des problèmes de physique (pour d > 1)

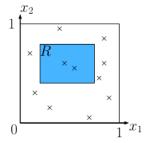
- maximin ⇔ empilement de sphères
- minimax ⇔ recouvrement de sphères



Source: L. Pronzato

Discrépance = mesure de non-uniformité Compare le nombre de points dans un hyper-rectangle avec le nombre attendu (en espérance) d'un échantillon issu de la distribution uniforme.

Exemple: plan à 11 points

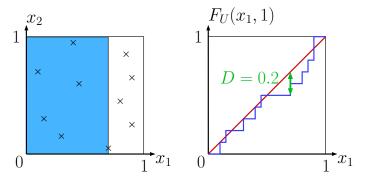


Proba (loi uniforme) d'être dans R: 0.22Ratio empirique : 2/11. Discrépance (par rapport à R): $D_R = |0.22 - 2/11| = 0.038$

Définition borne supérieure de la distance entre les fonctions de répatition empirique et analytique : $D = \sup \left| \frac{N_R}{N} - \frac{V_R}{V} \right|$

La discrépance est souvent calculée soit en :

- fixant un des sommets de R à l'origine
- en centrant R



Le maximum (par rapport à R) est obtenu pour R tangent à des points

→ sup calculé sur un ensemble discret

Résolution directe des problèmes d'optimisation?

$$\max_{\boldsymbol{x}_{1},...,\boldsymbol{x}_{\mathcal{N}}}\Phi\left[\boldsymbol{X}_{\mathcal{N}}\right]$$

avec Φ maximin, minimax ou discrépance.

Problème extrêmement difficile!!

- Grande dimension : $d \times N$
- Objectifs ni convexes, ni différentiables
- Minimax nécessite une boucle interne d'optimisation → très coûteux à évaluer

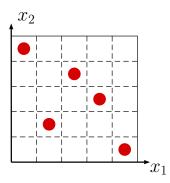
Réduction de nos ambitions (cf. suite du cours)

- Optimiser une classe de plans (LHS)
- Construire des plans avec de bonnes propriétés sans résoudre un problème d'optimisation : CVT, suites à faible discrépance

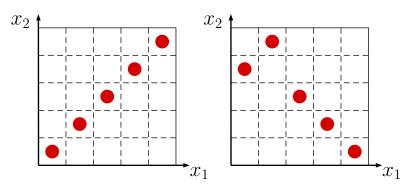
Plans remplissant l'espace : Hypercubes latins (LHS)

Hypercubes latins (Latin Hypercube Sampling, LHS)

- Plans aléatoires
- On découpe chaque dimension en n intervalles ($\Rightarrow n^d$ blocs)
- On prend un unique point par "ligne" et par "colonne"
- Les distributions marginales sont uniformes!



Pas de remplissage d'espace garanti...



They have to be combined with a criterion such as maximin.

Exercice

- Construire un LHS à 5 points en dimension 3
- Comment programmer une fonction lhs(n, d)?
- Comment optimiser un LHS afin qu'il remplisse l'espace?

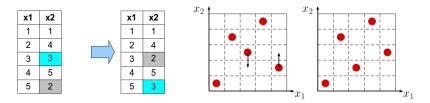
Solution (1/2)

Définition

Un hypercube latin à n points et d variables, LHS(n, d), est une matrice $n \times d$ dont chaque colonne est une permutation (normalisée) de $\{1, 2, \ldots, n\}$

Solution (2/2)

On peut permuter 2 cellules (ou blocs) d'une même colonne et conserver la structure LHS



⇒ Problème discret! On va utiliser des algorithmes d'échange.

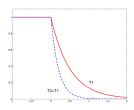
Recuit simulé - Morris et Mitchell [1995]

- 1. On génère un LHS initial
- 2. On cherche les points critiques au sens du critère maximin
- 3. On choisit aléatoirement une colonne d'un point critique
- 4. On effectue un **échange** avec une autre cellule de la même colonne prise aléatoirement
- 5. Si l'échange est bénéfique : on accepte la modification
- 6. Sinon : on accepte (quand même!) avec une probabilité :

$$\pi = \exp\left[rac{\phi_{\it ancien} - \phi_{\it nouveau}}{T}
ight]$$
 (si ϕ est à maximiser)

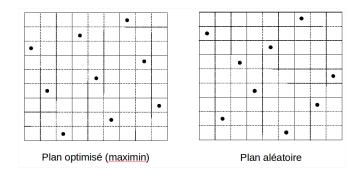
T décroît avec le temps

Par exemple :
$$T_k = \frac{T_0}{\log(k+1)}$$
.



LHS maximin

Le plan le plus utilisé pour les expériences numériques



Pour aller plus loin...

Un exemple de LHS en 2D : sudoku!

4	3	1	6	7	9	5	2	8
9	6	7	2	5	8	3	4	1
5	8	2	1	4	3	9	6	7
6	5	9	8	1	7	2	3	4
3	2	8	5	6	4	1	7	9
7	1	4	9	3	2	8	5	6
8	7	3	4	2	1	6	9	5
1	4	5	3	9	6	7	8	2
2	9	6	7	8	5	4	1	3

•	3	1	6	7	9	5	2	8
9	6	7	2	5	8	3	•	1
5	8	2	1	lacktriangle	3	9	6	7
6	5	9	8	1	7	2	3	•
3	2	8	5	6	•	1	7	9
7	1	lacktriangle	9	3	2	8	5	6
8	7	3	•	2	1	6	9	5
1	lacktriangle	5	3	9	6	7	8	2
2	9	6	7	8	5	lacksquare	1	3

Le sudoku possède des propriétés supplémentaires!

Niveau de stratification supplémentaire

Nous allons utiliser un outil complémentaire : tables orthogonales (OA)

Table orthogonale (OA): définition

- n lignes
- k colonnes
- Chaque élément prend une valeur entre 1 et q

X est de **force t** si, pour toute sous-matrice $n \times t$:

- Chaque valeur dans chaque colonne apparaît un nombre égal de fois
- Chaque combinaison de valeurs entre deux colonnes apparaît un nombre (λ) égal de fois
- On a : $\lambda \times q^t = n$

On note: OA(n, k, q, t)

Exemple

Table orthogonale:

- OA(n points, k dim, q valeurs, force t)
- Pour toute sous-matrice $n \times t$:
 - Chaque valeur dans chaque colonne apparaît un nombre égal de fois
 - Chaque combinaison de valeurs entre deux colonnes apparaît un nombre λ égal de fois
- lacksquare On a : $\lambda \times q^t = n$

λ=2									
		Α	В	С	D	E	F	G	
1 2 3		1 3 2	1 2 3	3 2 1	2 1 3	3 1 2	1 3 2	1 1 1	
4 5 6		1 3 2	2 3 1	1 3 2	1 3 2	2 3 1	1 3 2	2 2 2	
7 8 9		1 3 2	3 1 2	2 1 3	1 3 2	3 1 2	2 1 3	3 3 3	
10 11 12		1 3 2	3 1 2	1 3 2	2 1 3	1 2 3	3 2 1	1 1 1	
13 14 15		1 3 2	1 2 3	2 1 3	3 2 1	2 3 1	3 2 1	2 2 2	
16 17 18		1 3 2	2 3 1	3 2 1	3 2 1	1 2 3	2 1 3	3 3 3	

OA(18, 7, 3, 2)

LHS et tables orthogonales

- Tous les LHS sont des tables orthogonales de force 1
- $lue{}$ On peut construire un LHS à partir d'une table orthogonale de force >1
- Algorithme de Tang (1993): pour chaque colonne, pour chaque niveau s, on remplace toutes les instances de s par une permutation de

$$(s-1)\lambda q^{t-1}+1,\ldots,(s-1)\lambda q^{t-1}+\lambda q^{t-1}$$

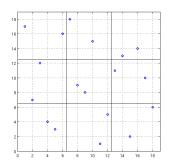
Exercice Construire un LHS à 4 points à partir de OA(n = 4, k = 2, q = 2, t = 2) OA(18,2,3,2):

3

3

3

2 expériences par carré :



Uniformité sur les marges de dimension $t:\lambda$ points dans chacune des q^t cellules

Récapitulatif : LHS et OA LHS

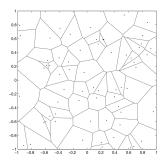
- Projections uniformes sur les marginales d'ordre 1
- Très facile à générer
- Pas de difficulté pour *N* et *d* grands
- Pas de duplication en projection
- MAIS pas de remplissage d'espace sans optimisation
- \Rightarrow Alternative à l'optimisation : niveau de stratification supplémentaire
 - Propriétés plus complexes atteignables : OA, tms-Net
 - Intérêts :
 - ► Limite les "trous" dans les sous-espaces
 - Meilleure capture des interactions
 - Défaut : nombre de points fortement contraint
- ⇒ Difficile à mettre en oeuvre! Cf. package planor

Plans remplissant l'espace : Tessellations Centroïdales de Voronoï (CVT)

Etant donné un ensemble de points générateurs $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$, la **cellule de Voronoi** \mathcal{C}_i associée au point \mathbf{x}_i est la region de l'espace telle que :

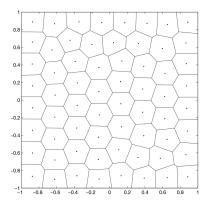
$$\forall \mathbf{x} \in C_i, d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \leq d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j), \quad i \neq j$$

Tessellation de Voronoi = ensemble des cellules $\{C_1, \dots, C_n\}$



Source: Q. Du et Al., Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms, SIAM Review, 41-4, 1999.

Tessellation Centroïdale de Voronoï (CVT) est un cas particulier des Tesselations de Voronoi où les points générateurs correspondent aux centres de masse des cellules :



Source: Q. Du et Al., Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms, SIAM Review, 41-4, 1999.

Propriétés des CVT

Les CVT sont des points stationnaires de :

$$\sum_{i=1}^k \int_{V_i} \|y-z_i\|^p dy, \quad p \ge 1$$

- Distorsion : $H(z_i, V_i) = \sum_{i=1}^k \int_{V_i} ||y z_i||^2 dy$
- Quadrature :

$$\int_{\Omega} f(y) dy \approx \sum_{i=1}^k \int_{V_i} f(z_i) dy = \sum_{i=1}^k A_i f(z_i), \text{ avec } A_i = \text{volume}(V_i)$$

avec $A_i = \text{volume}(V_i)$. Pour f lipschitzienne :

$$Q = \left| int_{\Omega} f(y) dy - \sum_{i=1}^{k} A_i f(z_i) \right| \leq L \sum_{i=1}^{k} \int_{V_i} \|y - z_i\| dy$$

CVT et planification

Propriétés de stationnarité

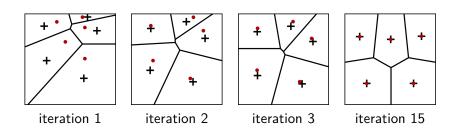
- Distorsion minimale : chaque point de l'espace est proche d'un point générateur
- Bonne approximation constante par morceaux
- Propriétés indépendantes de la dimension de l'espace

Conséquences

- Bon remplissage d'espace
- On utilise les points générateurs comme plan d'expériences

Construction des CVT : algorithme de Lloyd

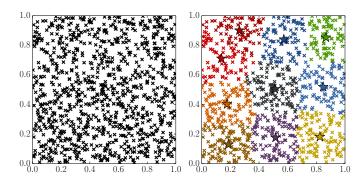
- 1 Générer un ensemble **X** de *n* points
- 2 Tant que $i < nb_{iter}$
- 3 Calculer la tessellation associée à X
- X =centre de masse de chaque cellule



source: page wikipedia, "Lloyd's algorithm"

Construction des CVT: k-means

Très proche de Lloyd, mais basé sur un grand ensemble discret de points au lieu du domaine continu :

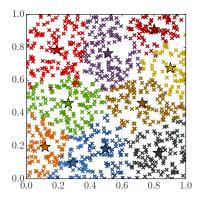


Construction des CVT : algorithme de McQueen

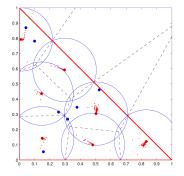
Beaucoup plus rapide (bien qu'il demande beaucoup d'itérations)

- 1 Générer un ensemble **X** de *n* points
- 2 Initialiser *j* un vecteur de 1 de longueur *n*
- 3 Tant que $i < nb_{i}$
- 4 Générer aléatoirement un point w
- 5 Chercher le point générateur x_k le plus proche d w
- Mettre à jour : $x_k = \frac{j_k x_k + w}{j_{\nu} + 1}$
- 7 $j_k = j_k + 1$

Construction des CVT : algorithme de McQueen



Fonctionne pour un espace X quelconque



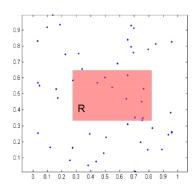
source: L. Pronzato - Ecole PECNUM' 2016

Plans remplissant l'espace : suites à faible discrépance

Rappel de la discrépance

Mesure d'uniformité de la répartition des points dans l'espace

$$D = \sup \left| \frac{N_R}{N} - \frac{V_R}{V} \right|$$



Suites à faible discrépance

Les suites à faible discrépance sont des suites déterministes qui convergent vers la distribution uniforme.

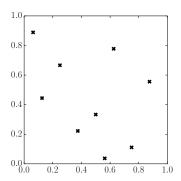
- Elles remplissent l'espace uniformément et "rapidement"
- Elles sont faciles à construire
- On peut facilement ajouter des points

Beaucoup de ces suites existent : Halton, Hammerley, Sobol', Faure, van der Corput, ...

Exemple : suite de Halton

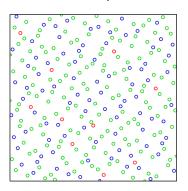
Basée sur d entiers sans diviseurs communs. Pour d=2, avec les entiers (2,3) la suite s'écrit :

$$x_1 = 1/2$$
, 1/4, 3/4, 1/8, 5/8, 3/8, 7/8, 1/16, 9/16,...
 $x_2 = 1/3$, 2/3, 1/9, 4/9, 7/9, 2/9, 5/9, 8/9, 1/27,...

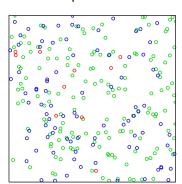


Exemple : suite de Halton (256 points)

Halton Sequence



uniform pseudo random



source: wikipedia

Définitions / Propriétés

Suites équiréparties : une des trois conditions est vérifiée

- $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n f(x_i) \to \int f(x)dx$
- $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{f(x_i) \in [0, v]^d} \to \text{Vol}([0, y]^d)$
- Discrépance empirique $D_n \rightarrow 0$

Il existe des suites équiréparties telles que :

$$\left|\frac{1}{n}\left|\sum_{i}f(x_{i})-\int f(x)dx\right|\leq c(f)\frac{\log(n)^{d}}{n}\right|$$

- ⇒ Suites à faible discrépance
 - Tirage uniforme (Monte-Carlo) : $c(f) = \frac{1}{\sqrt{n}}$
 - Plan factoriel (grille) : $c(f)^{\frac{1}{n}}$

Limites des suites à faible discrépance

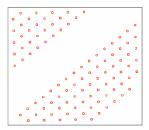
Pour *n* petit

Ne remplit pas forcément l'espace (cf. exemple de Halton)

Pour d grand

- Alignements en projections
- "Trous" dans les sous-espaces

Ex.: Halton en 8 dimensions, 80 points: (X7, X8)



Source: thèse J. Franco, 2008

Récapitulatif : remplissage d'espace

Plusieurs critères de "qualité"

- intra-distances : Maximin
- inter-distances : minimax
- uniformité : discrépance
- projection / stratification

Plusieurs familles de plans

- Hypercubes latins
- Tessellations centroïdales de Voronoï
- Suites à faible discrépance

Pas de solution universelle!