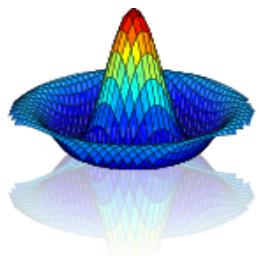
Exploration de surfaces de réponse par régression

École Chercheurs Mexico

Robert Faivre

INRA - Biométrie et Intelligence Artificielle, MIA Toulouse

Giens, le 13 Mai 2009



MEXICO

Plan

Plan

Objectifs et Enjeux

On dispose de valeurs simulées en certains points (ici 2D) échantillonnés sur un domaine (espace continu). On cherche à avoir une estimation (prédiction) de la réponse sur tout le plan

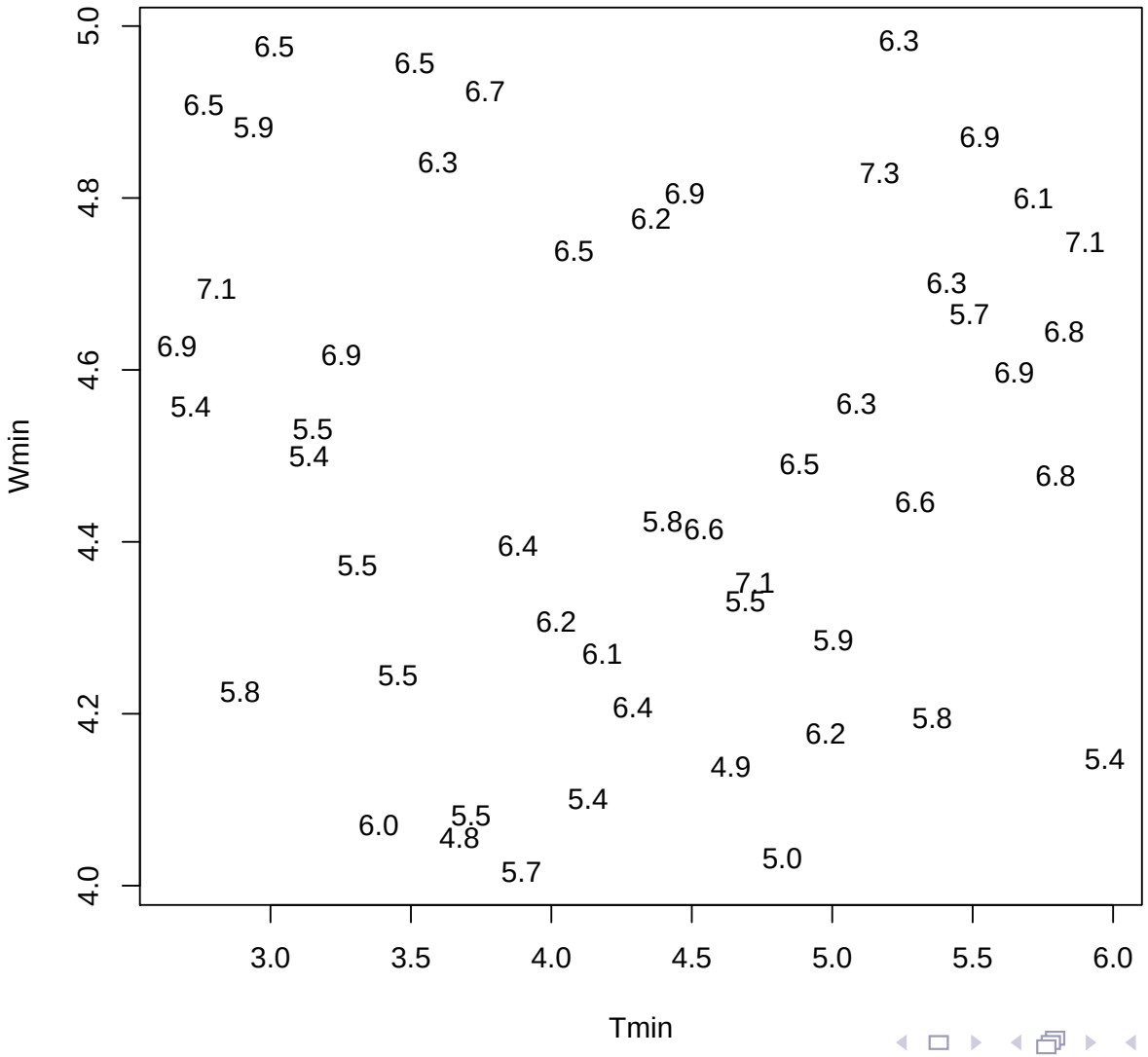
- Donner à voir (souvent en 2D)
  - courbes de niveau, images, perspective 3D, en dynamique 3D
- Prédire avec un modèle plus manipulable (méta-modèle)
  - fournir de l'intelligibilité (écriture analytique ou plus compréhensible)
  - réduire les temps de calcul (pour les prédictions et réutilisation)
  - permettre les calculs des indices de sensibilité (voir présentation de B. looss)
  - simplifier (choix de modèle)

$$y = \mathcal{G}(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

$$y \approx f(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

Visualisation de Résultats

Back



Objectifs et Enjeux

On dispose de valeurs simulées en certains points (ici 2D) échantillonnés sur un domaine (espace continu). On cherche à avoir une estimation (prédiction) de la réponse sur tout le plan

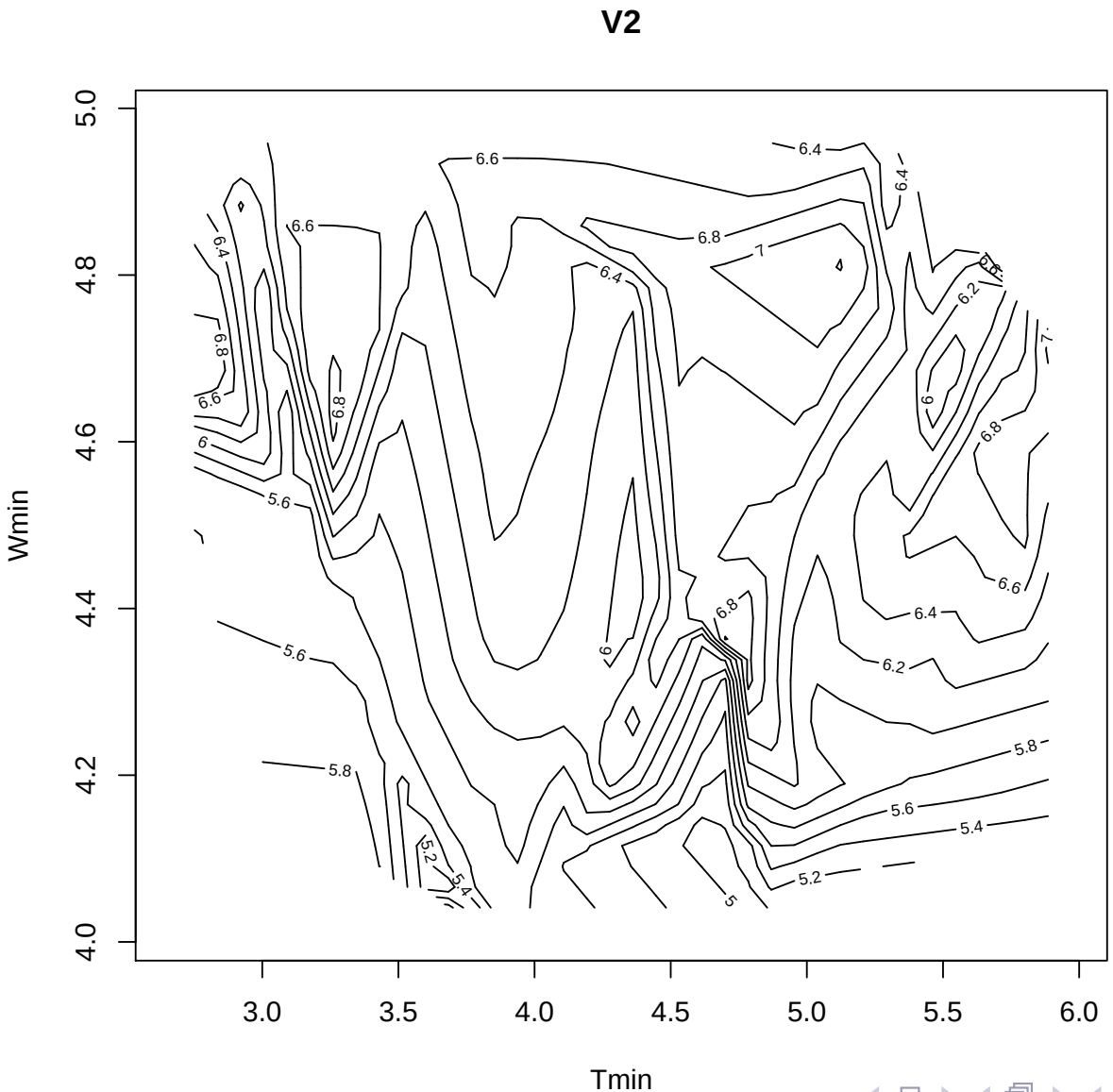
- Donner à voir (souvent en 2D)
  - courbes de niveau, images, perspective 3D, en dynamique 3D
- Prédire avec un modèle plus manipulable (méta-modèle)
  - fournir de l'intelligibilité (écriture analytique ou plus compréhensible)
  - réduire les temps de calcul (pour les prédictions et réutilisation)
  - simplifier (choix de modèle)

$$y = \mathcal{G}(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

$$y \approx f(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

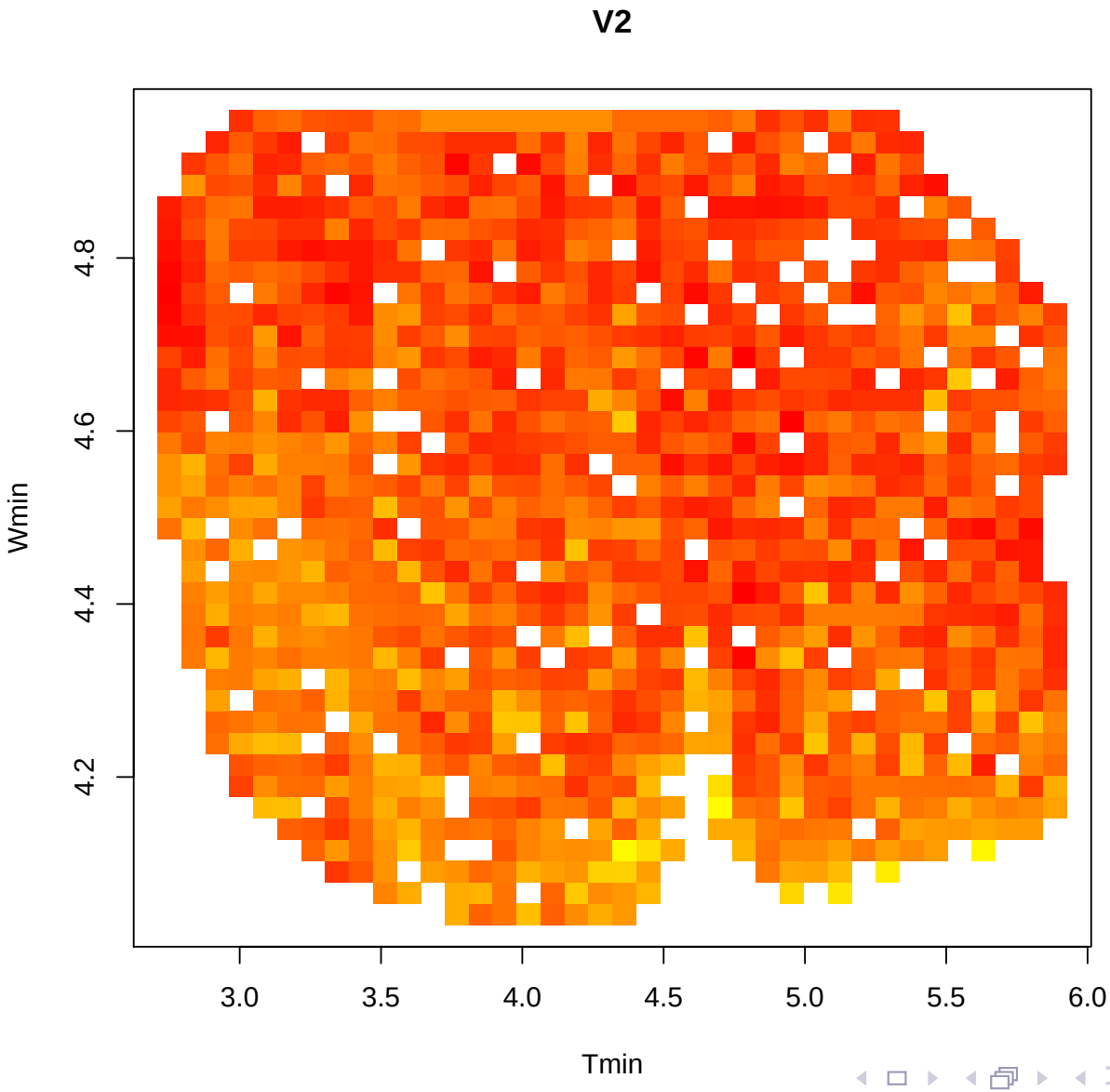
Visualisation de Résultats

Back



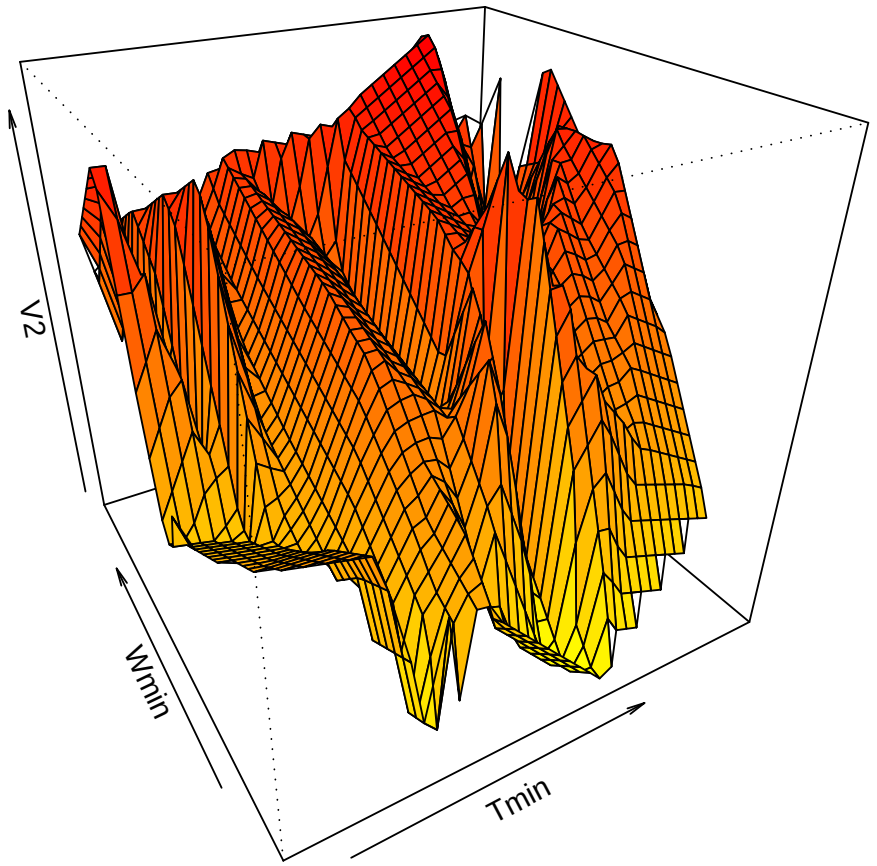
Visualisation de Résultats

Back



Visualisation de Résultats

Back



Objectifs et Enjeux

On dispose de valeurs simulées en certains points (ici 2D) échantillonnés sur un domaine (espace continu). On cherche à avoir une estimation (prédiction) de la réponse sur tout le plan

- Donner à voir (souvent en 2D)
  - courbes de niveau, images, perspective 3D, en dynamique 3D
- Prédire avec un modèle plus manipulable (méta-modèle)
  - fournir de l'intelligibilité (écriture analytique ou plus compréhensible)
  - réduire les temps de calcul (pour les prédictions et réutilisation)
  - simplifier (choix de modèle)

$$y = \mathcal{G}(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

$$y \approx f(x^{(1)}, x^{(2)}, ..., x^{(K)})$$

Questions

Quelles sont les valeurs entre les points ? Comment les obtenir "facilement" ? Trois questions liées comme d'habitude :

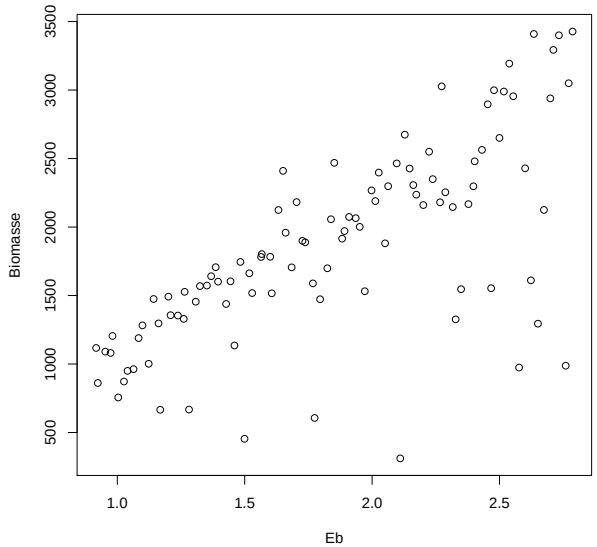
- Quel plan d'expérience ?
- Quel modèle d'interpolation, d'estimation, de prédiction ?
- Quel critère de comparaison de modèles ?

$\Longrightarrow$ Problématique de modélisation statistique "standard"

Basée principalement sur l'article de **Storlie et Helton, 2008**. Multiple predictor smoothing methods for sensitivity analysis : Description of techniques. *Reliability Engineering and Safety*, **93**, 28-54.

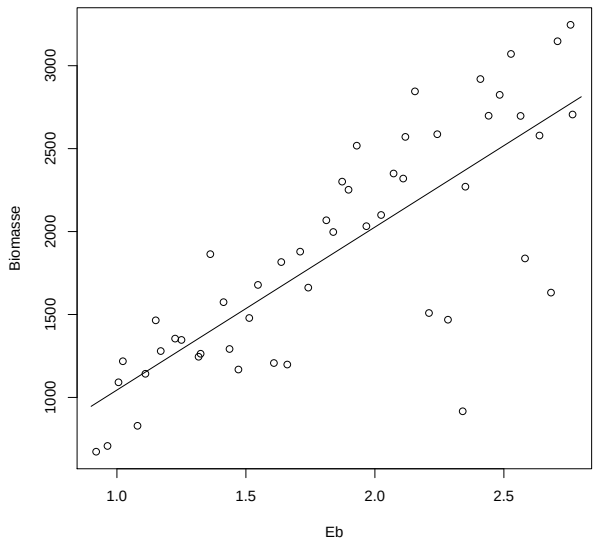
Plan

Eléments principaux



- écriture du modèle de régression
- estimateurs des paramètres
- critère d'ajustement
- critère de comparaison de modèles (test sur les paramètres)
- extension multidimensionnelle
- plans d'expérience optimaux

Ecriture de modèle et estimation des paramètres



$$y = \mu + \beta x + \varepsilon \qquad \text{lm(y} \sim \text{x)}$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 \qquad \text{lm(y} \sim \text{x + I(x\^{} 2))}$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + ... + \beta_p x^p + \varepsilon \qquad \text{lm(y} \sim \text{poly(x,p))}$$

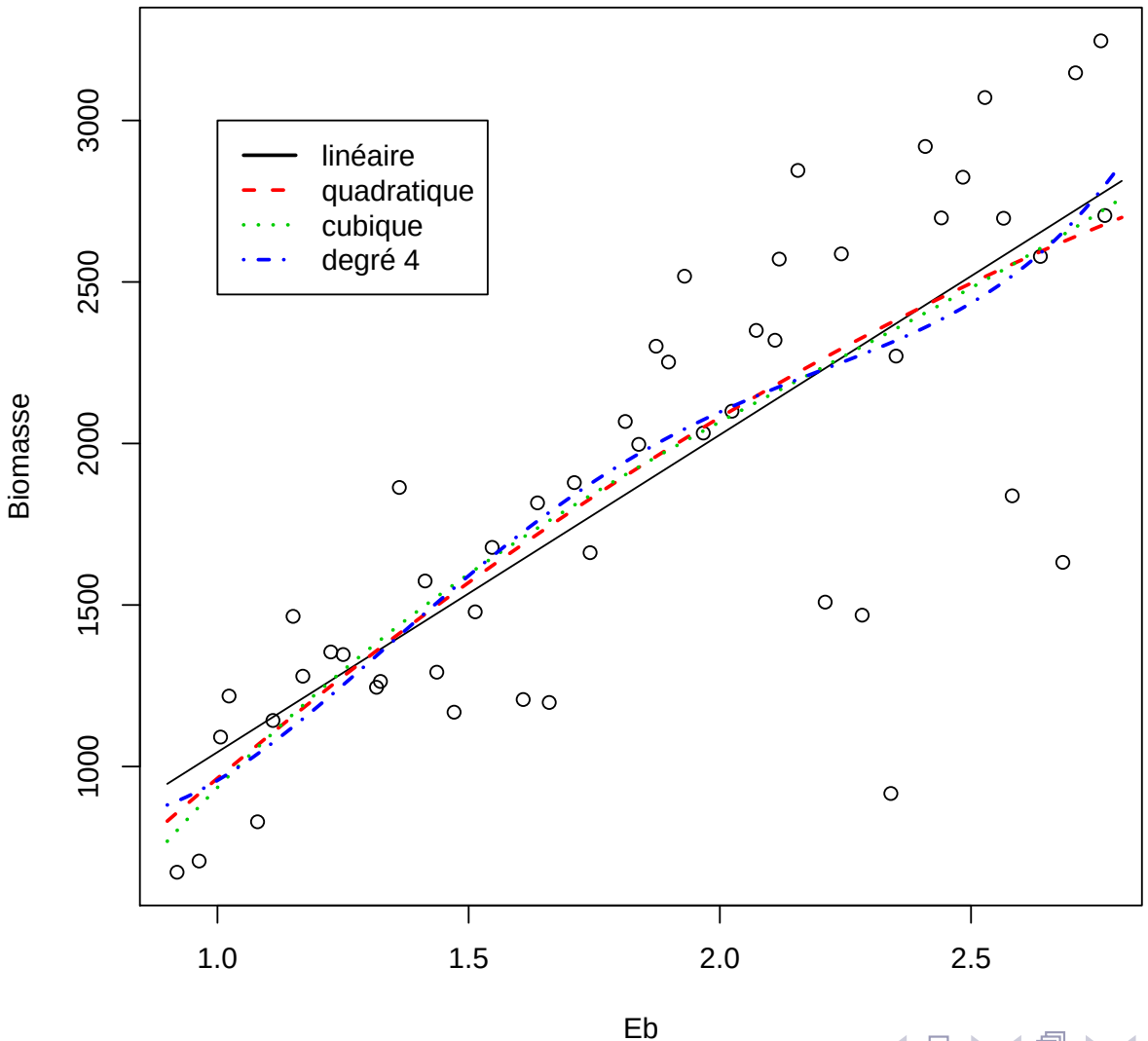
$$y = X\Theta + \varepsilon$$

$$\widehat{\Theta} = (X'X)^{-1}X'Y \qquad \text{coef(modèle estimé)}$$

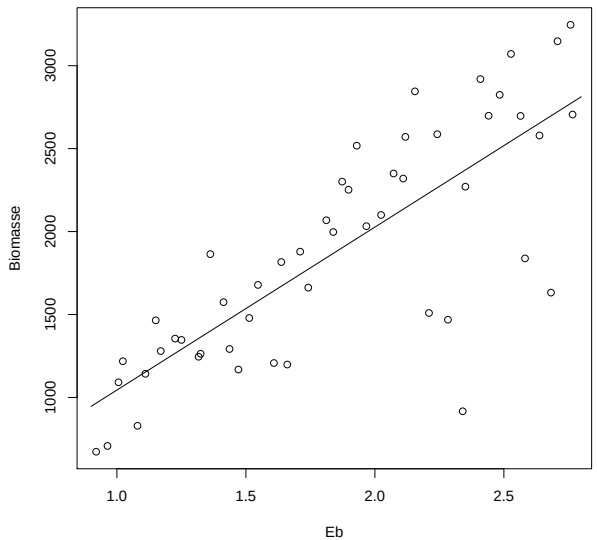
fitted (aux x observés) ; predict (pour les nouveaux x)

Modèle wwdm et régressions linéaires

Back



Ecriture de modèle et estimation des paramètres



$$y = \mu + \beta x + \varepsilon \qquad \text{lm(y} \sim \text{x)}$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 \qquad \text{lm(y} \sim \text{x + I(x\^{} 2))}$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + ... + \beta_p x^p + \varepsilon \qquad \text{lm(y} \sim \text{poly(x,p))}$$

$$y = X\Theta + \varepsilon$$

$$\widehat{\Theta} = (X'X)^{-1}X'Y \qquad \text{coef(modèle estimé)}$$

fitted (aux x observés) ; predict (pour les nouveaux x)

Critères d'ajustement

- Qualité d'ajustement sur un *a priori* sur les "critères"

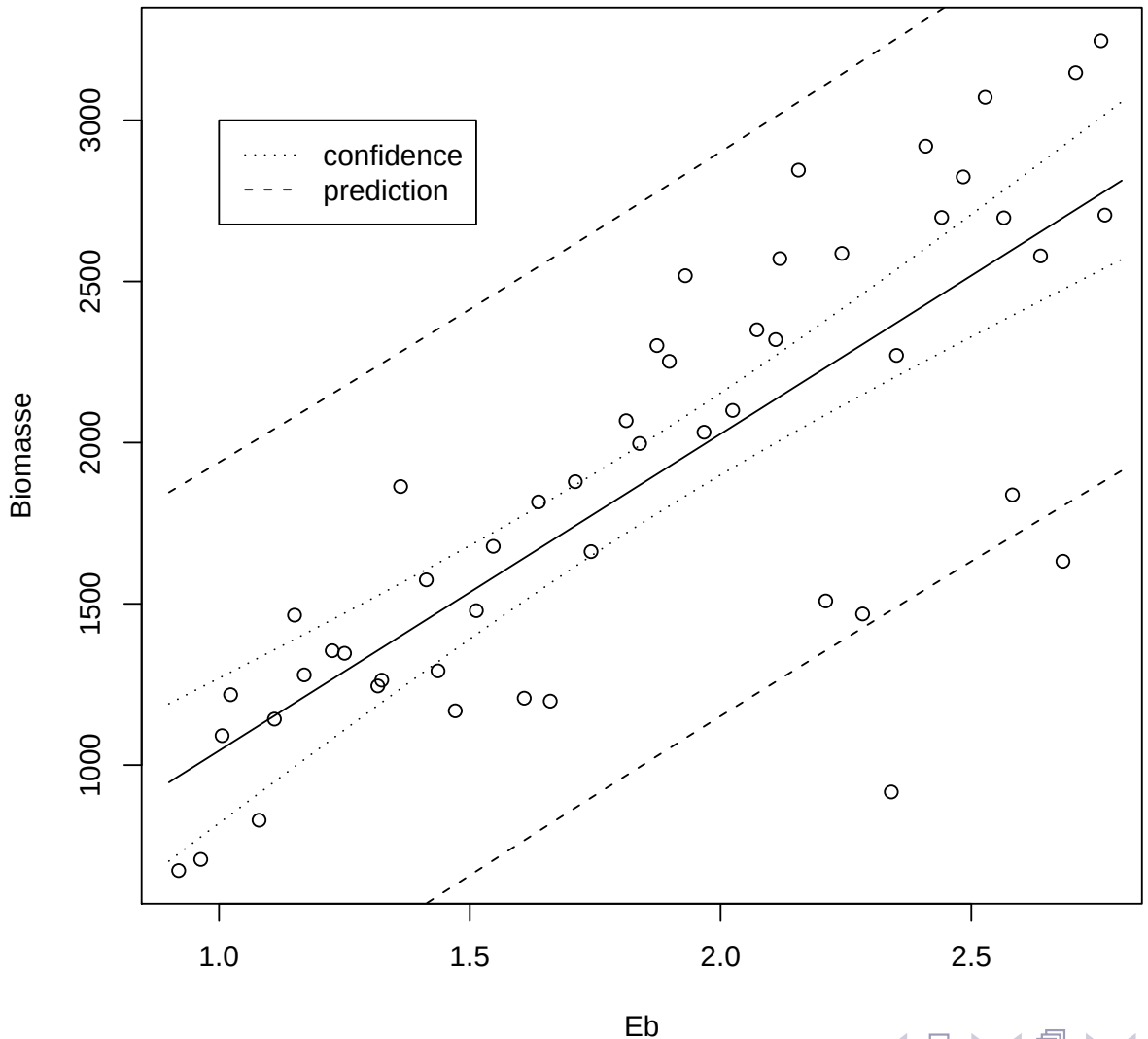
  Variance d'erreur estimée : $\widehat{\sigma^2} = \frac{SSE}{n-p} = \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-p}$

  Coefficient de détermination : $R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$

- Analyse des résidus
- Intervalles de confiance : predict($\widehat{modele}$, newdata, interval = "prediction")

Modèle wwdm et intervalles de confiances

Back



Critères d'ajustement

- Qualité d'ajustement sur un *a priori* sur les "critères"

  Variance d'erreur estimée : $\widehat{\sigma^2} = \frac{SSE}{n-p} = \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-p}$

  Coefficient de détermination : $R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$

- Analyse des résidus
- Intervalles de confiance : predict($\widehat{modele}$, newdata, interval = "prediction")

Comparaison de modèles

Analogie avec la méthodologie statistique "classique" bien que nous sommes dans le cas de l'expérimentation numérique.

On part du modèle le plus "paramétré" (complet) et on le simplifie par un modèle (1) plus grossier ($p_1 < p$)

Perte d'explication :	$SSE^{(1)} - SSE^{complet}$	$p - p_1$
Base de la variabilité :	$SSE^{complet}$	$n - p$
Test :	$\frac{(SSE^{(1)} - SSE^{complet})/(p-p_1)}{SSE^{complet}/(n-p)}$	$F(p - p_1; n - p)$

summary ; anova ; step ; update

Cas multidimensionnel

Mêmes principes que pour l'unidimensionnel : les estimateurs des paramètres, le critère d'ajustement et les stratégies de tests sont les mêmes.

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{K}(\beta_j x_j + \beta_2 x_j^2) + \sum_{j=1}^{K}\sum_{k=j+1}^{K} \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon$$

$$\widehat{\Theta} = (X'X)^{-1}X'Y$$

lm (Biomasse $\sim$ polym(Eb,Lmax,B,degree=2))

Ensuite, méta modèle sélectionné.

Modèle wwdm : modèle multiplicatif

Back

```
Call:
lm(formula = Biomasse ~ polym(Eb, Lmax, B, degree = 2))

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-1086.74  -147.33    25.77   208.71   622.26

Coefficients:
                                    Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)                          1854.24      51.32  36.130  < 2e-16 ***
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)1.0.0  3392.80     362.36   9.363 1.24e-11 ***
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)2.0.0  -231.37     402.85  -0.574  0.56896
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)0.1.0  1296.96     361.88   3.584  0.00091 ***
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)1.1.0  1736.60    2387.38   0.727  0.47121
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)0.2.0  -741.90     387.95  -1.912  0.06301 .
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)0.0.1 -1125.12     367.55  -3.061  0.00393 **
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)1.0.1 -4862.94    2799.03  -1.737  0.09002 .
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)0.1.1  1126.25    2963.05   0.380  0.70588
polym(Eb, Lmax, B, degree = 2)0.0.2  -547.67     419.38  -1.306  0.19904
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 347 on 40 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7953,   Adjusted R-squared: 0.7492
F-statistic: 17.26 on 9 and 40 DF,  p-value: 3.488e-11
```

Cas multidimensionnel

Mêmes principes que pour l'unidimensionnel : les estimateurs des paramètres, le critère d'ajustement et les stratégies de tests sont les mêmes.

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{K}(\beta_j x_j + \beta_2 x_j^2) + \sum_{j=1}^{K}\sum_{k=j+1}^{K} \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon$$

$$\widehat{\Theta} = (X'X)^{-1}X'Y$$

lm (Biomasse $\sim$ polym(Eb,Lmax,B,degree=2))

Ensuite, méta modèle sélectionné.

Modèle wwdm : méta modèle

Back

```
Call:
lm(formula = Biomasse ~ Eb + Eimax + Eb:Eimax + K + Eb:Lmax + Eb:I(Lmax^2) + Eb:A + Eb:Lmax:A + I(A^2)
+
Eb:I(A^2) + I(A^3) + Eb:B + A:B + Eb:A:B + I(A^2):B + Eb:I(B^2) + TI + Eimax:TI + Eb:A:TI + I(A^2):TI
+ B:TI +
Eb:B:TI + A:B:TI + I(TI^2) + B:I(TI^2))

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-520.8318  -93.7253   -0.7456   93.0730  514.5766
```

Biomasse ~ polym(Eb, Eimax, K, Lmax, A, B, TI,degree=3)

Residual standard error: 142.9 on 974 degrees of freedom	141.2 on 880 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9602, Adjusted R-squared: 0.9591	0.9648, 0.9601
F-statistic: 938.9 on 25 and 974 DF, p-value: < 2.2e-16	202.9 on 119 and 880 DF, p: < 2.2e-16

```
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -9.734e+03  1.465e+03  -6.645 5.03e-11 ***
Eb          -1.148e+03  3.679e+02  -3.121 0.001856 **
Eimax        4.081e+03  1.480e+03   2.758 0.005926 **
K            4.498e+02  7.922e+01   5.678 1.80e-08 ***
I(A^2)      -1.202e+08  9.965e+06 -12.064  < 2e-16 ***
I(A^3)       9.261e+09  6.379e+08  14.518  < 2e-16 ***
TI           2.113e+01  1.927e+00  10.965  < 2e-16 ***
I(TI^2)     -9.356e-03  8.477e-04 -11.036  < 2e-16 ***
Eb:Eimax     1.434e+03  3.196e+02   4.486 8.11e-06 ***
Eb:Lmax      1.181e+02  6.816e+00  17.322  < 2e-16 ***
Eb:I(Lmax^2) -4.141e+00  3.876e-01 -10.683  < 2e-16 ***
Eb:A         4.469e+05  4.647e+04   9.617  < 2e-16 ***
Eb:I(A^2)   -2.714e+07  2.430e+06 -11.170  < 2e-16 ***
Eb:B        -1.267e+06  1.372e+05  -9.233  < 2e-16 ***
```

Plans d'expérience optimaux

Optimalité = estimabilité de tous les paramètres + régularité de la précision sur toute la zone en utilisant un minimum de points pour une qualité donnée.
Connu : nombre de points par facteur > degré du polynome (3 points pour un polynome de degré 2)

- plans factoriels complets $\longrightarrow$ fractionnaire (même principe que pour l'AOV)
- Box-Behnken, ...
- Voir DOCUMENTATION/Surface_de_reponse sur la clé ; Govaerts par exemple

Plan

Principes généraux

- exemples de modèles non paramétriques
- critère d'ajustement
- critère de comparaison de modèles
- extension multidimensionnelle
- plans d'expérience

Fenêtre glissante (ksmooth) et régression locale (loess)

Fenêtre glissante : on se déplace le long de l'axe x et on estime avec les données autour (bandwidth d) selon un modèle k particulier

$$\hat{f}(x) = \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h) y_i / \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h)$$

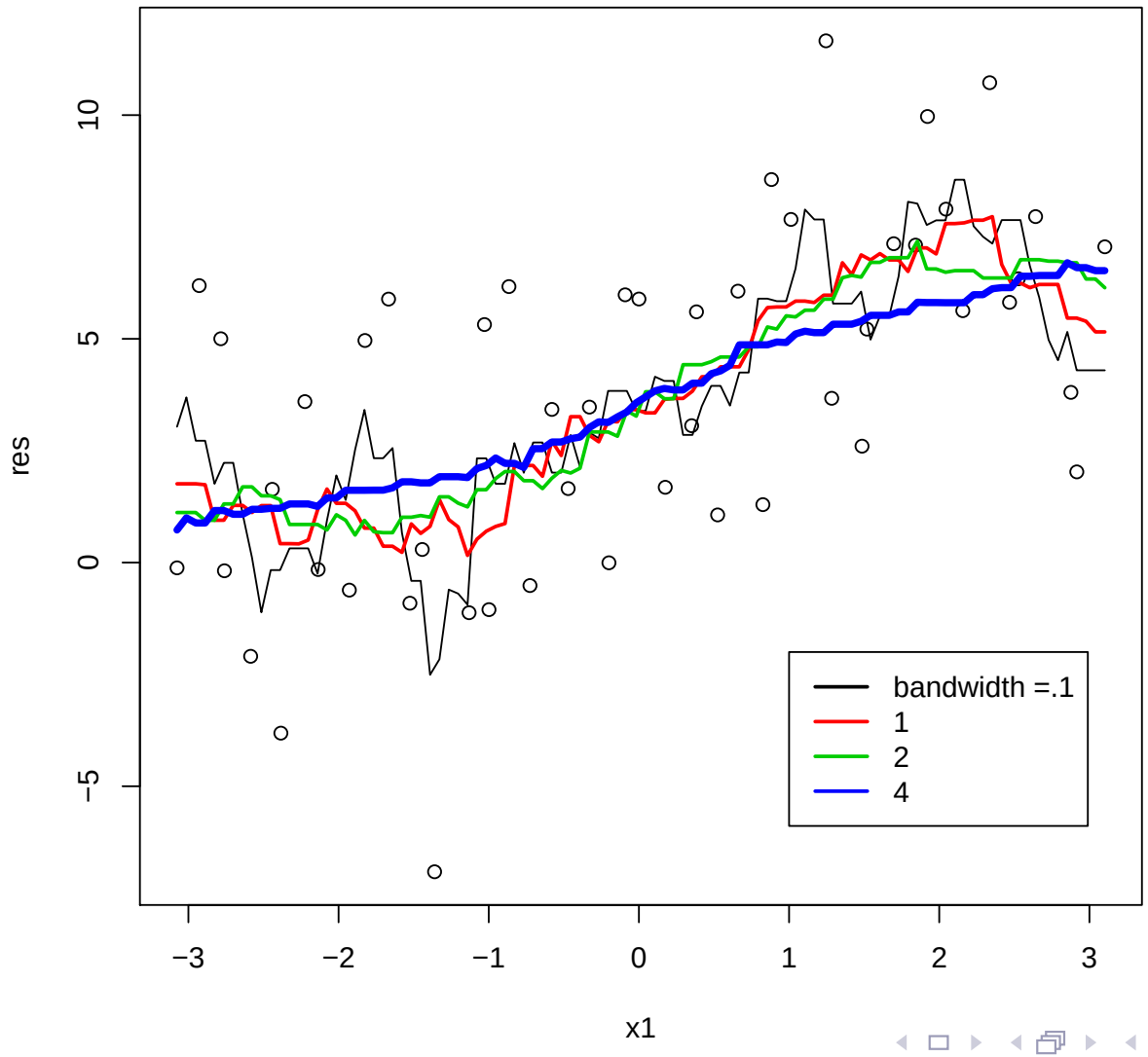
$$k(z,h) = \begin{cases} \mathbf{I}_{[0,d]}(\mid z \mid) & \text{moyenne glissante} \\ \frac{1}{h\sqrt{2\pi}} exp(-\frac{z^2}{2h^2}) & \text{moyenne locale pondérée noyau gaussien} \end{cases}$$

Extension à la régression polynomiale ($\rightarrow$ 2) locale et au multidimensionnel.

Avantage : suit bien les données
Inconvénient : il faut en avoir beaucoup, surtout en multidimensionnel

Modèle ishigami : ksmooth

Back



Fenêtre glissante (ksmooth) et régression locale (loess)

Fenêtre glissante : on se déplace le long de l'axe x et on estime avec les données autour (bandwidth d) selon un modèle k particulier

$$\hat{f}(x) = \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h) y_i / \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h)$$

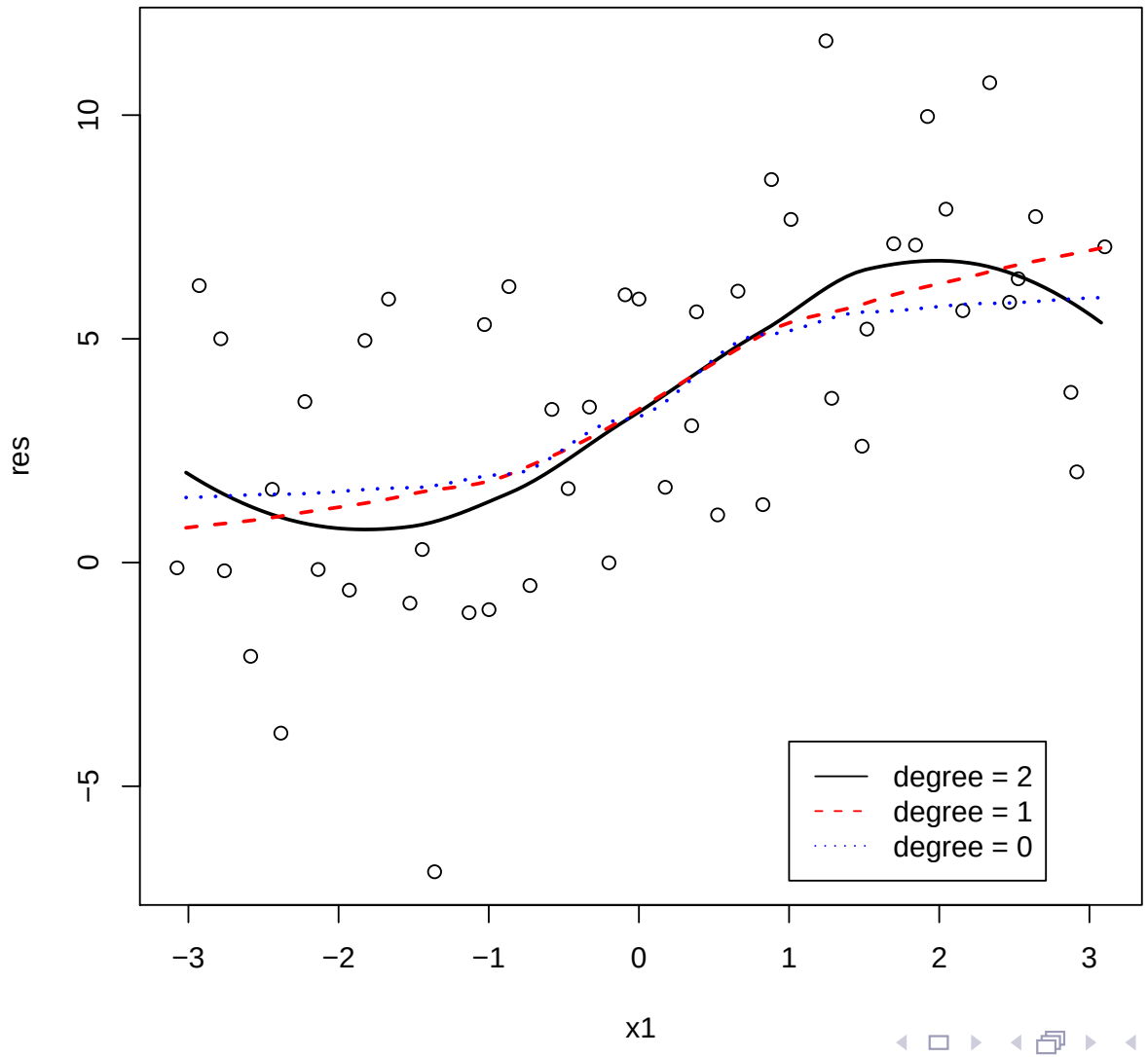
$$k(z,h) = \begin{cases} \mathbf{I}_{[0,d]}(\mid z \mid) & \text{moyenne glissante} \\ \frac{1}{h\sqrt{2\pi}} exp(-\frac{z^2}{2h^2}) & \text{moyenne locale pondérée noyau gaussien} \end{cases}$$

Extension à la régression polynomiale ($\rightarrow$ 2) locale et au multidimensionnel.

Avantage : suit bien les données
Inconvénient : il faut en avoir beaucoup, surtout en multidimensionnel

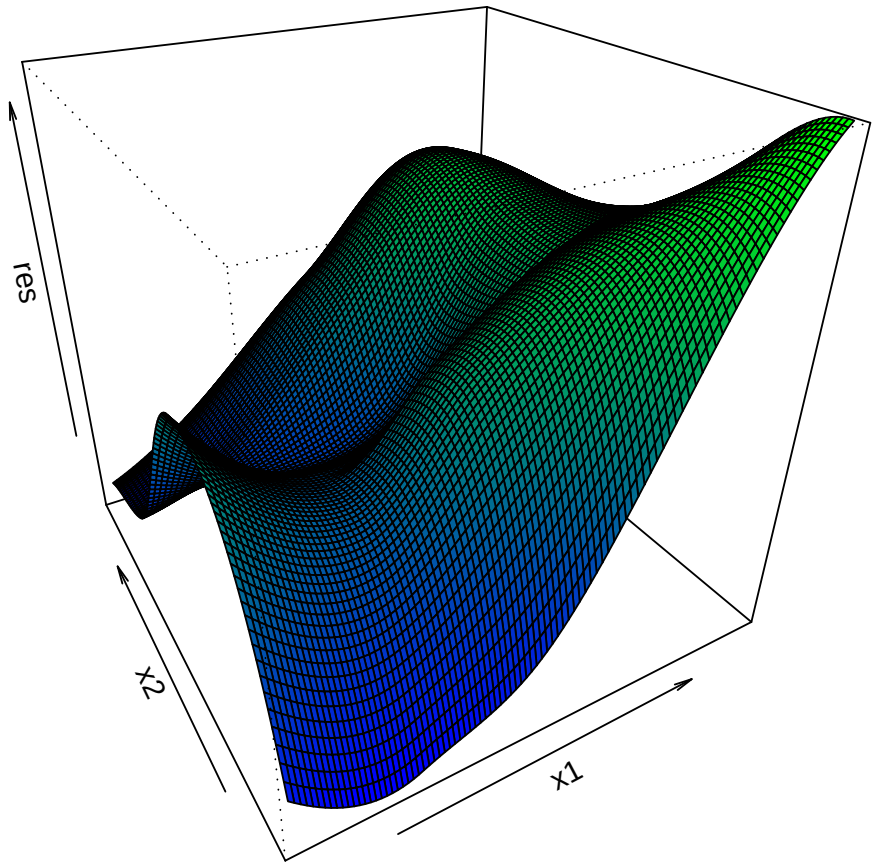
Modèle ishigami : loess (res ∼ x1, degree = 2)

Back



Modèle ishigami : loess (res ∼ loess(x1,x2))

Back



Fenêtre glissante (ksmooth) et régression locale (loess)

Fenêtre glissante : on se déplace le long de l'axe x et on estime avec les données autour (bandwidth d) selon un modèle k particulier

$$\hat{f}(x) = \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h) y_i / \sum_{i}^{n} k(x_i - x; h)$$

$$k(z,h) = \begin{cases} \mathbf{I}_{[0,d]}(\mid z \mid) & \text{moyenne glissante} \\ \frac{1}{h\sqrt{2\pi}} exp(-\frac{z^2}{2h^2}) & \text{moyenne locale pondérée noyau gaussien} \end{cases}$$

Extension à la régression polynomiale ($\rightarrow$ 2) locale et au multidimensionnel.

Avantage : suit bien les données
Inconvénient : il faut en avoir beaucoup, surtout en multidimensionnel

Splines de lissage

Critère à minimiser

$$\sum_{i}^{n}[y_i - \hat{f}(x_i)]^2 + \lambda \int_a^b [d^2\hat{f}(x)/dx^2]^2 dx$$

(fidélité aux données + régularité)

Ajout d'une pénalité qui lisse la fonction pour éviter les fluctuations trop grandes $\longrightarrow$ paramètre de lissage λ

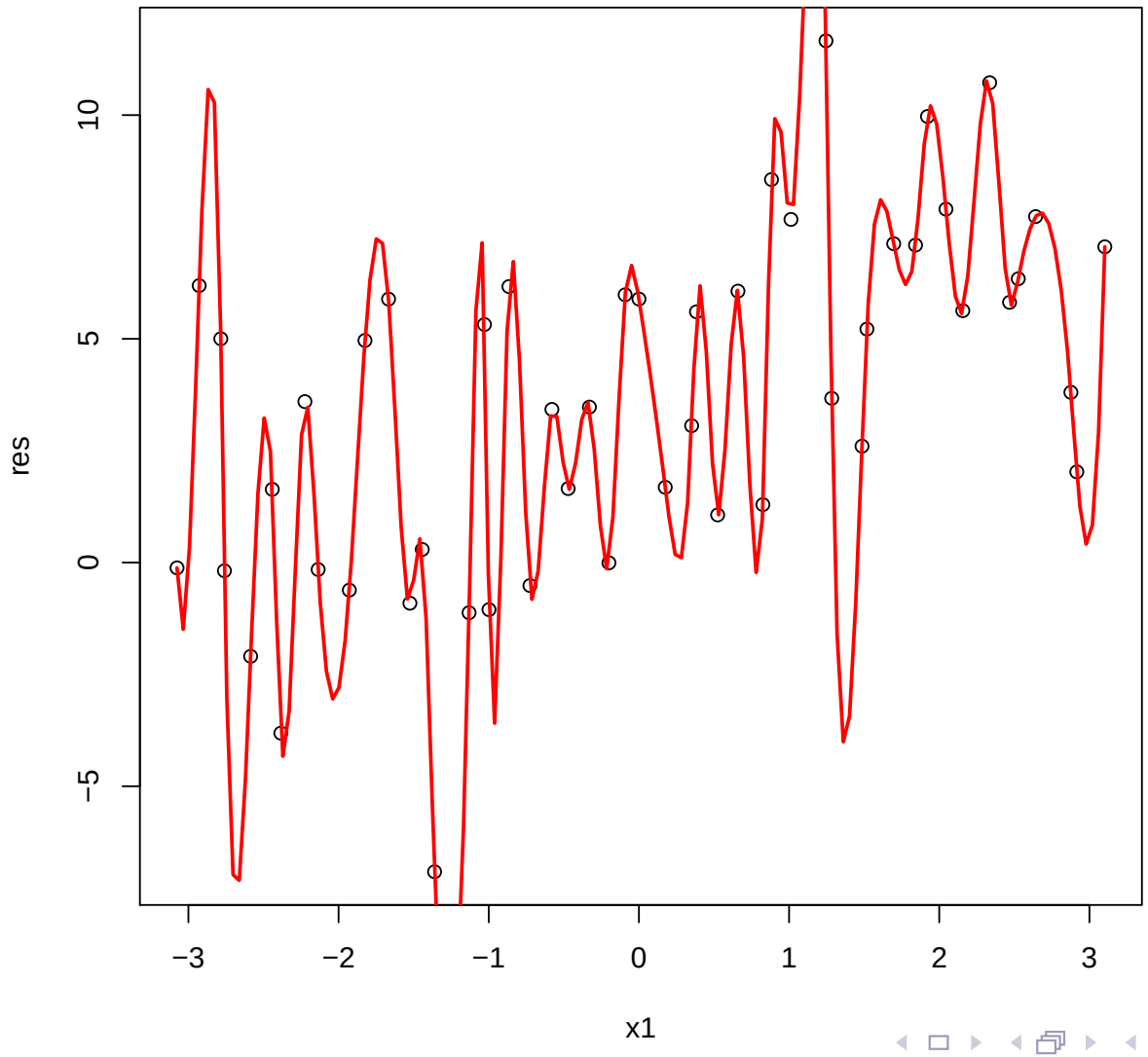
Décomposition sur une base de fonctions : splines cubiques et thin plate.

$$\hat{f}(x_i) = \sum_{j=1}^{p+q} \theta_j S_j(x_i)$$

$\Longrightarrow$ proche de la régression.

Modèle ishigami : spline d'interpolation

Back



Splines de lissage

Critère à minimiser

$$\sum_{i}^{n}[y_i - \hat{f}(x_i)]^2 + \lambda \int_a^b [d^2\hat{f}(x)/dx^2]^2 dx$$

(fidélité aux données + régularité)

Ajout d'une pénalité qui lisse la fonction pour éviter les fluctuations trop grandes $\longrightarrow$ paramètre de lissage λ

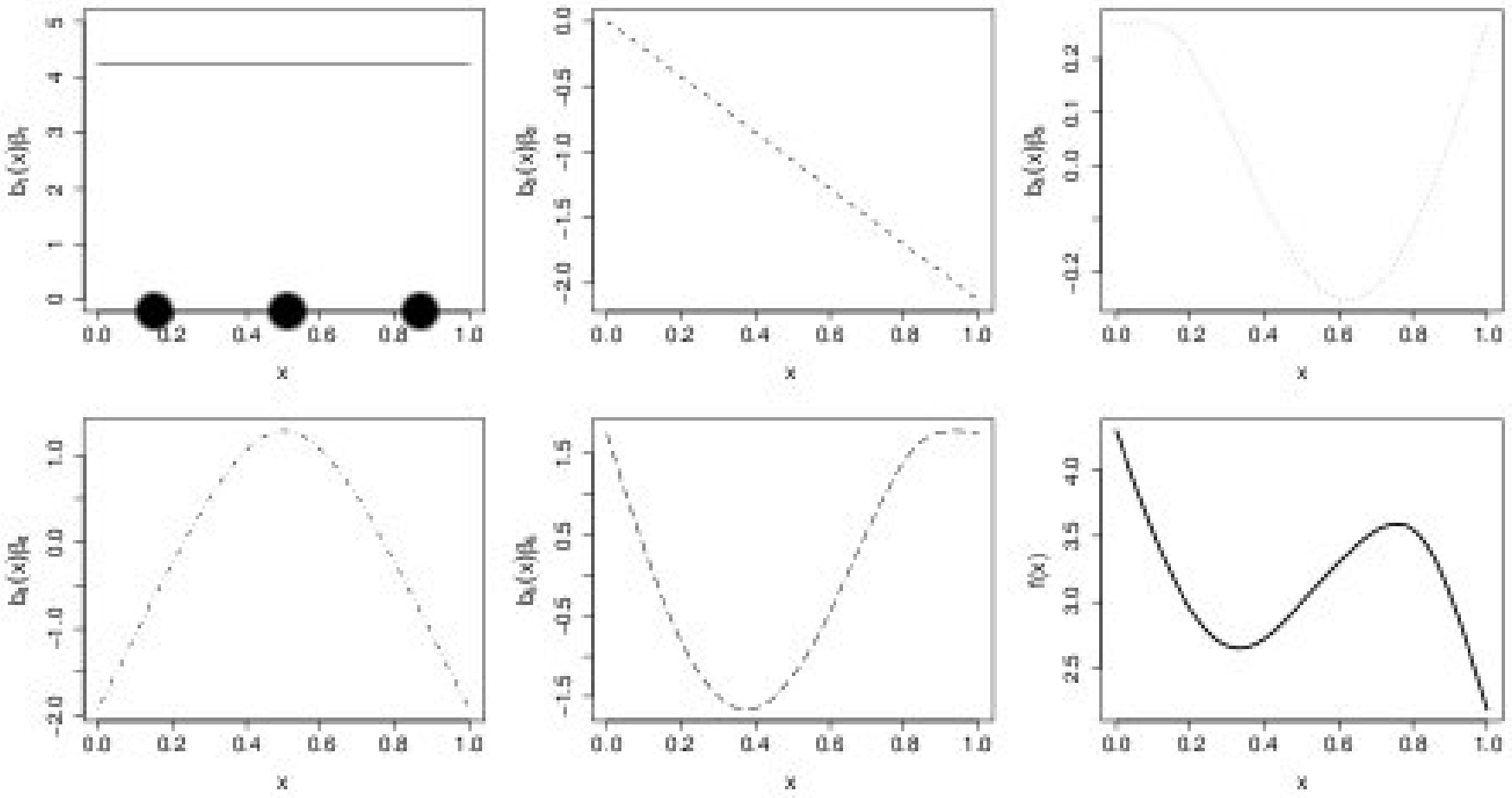
Décomposition sur une base de fonctions : splines cubiques et thin plate.

$$\hat{f}(x_i) = \sum_{j=1}^{p+q} \theta_j S_j(x_i)$$

$\Longrightarrow$ proche de la régression.

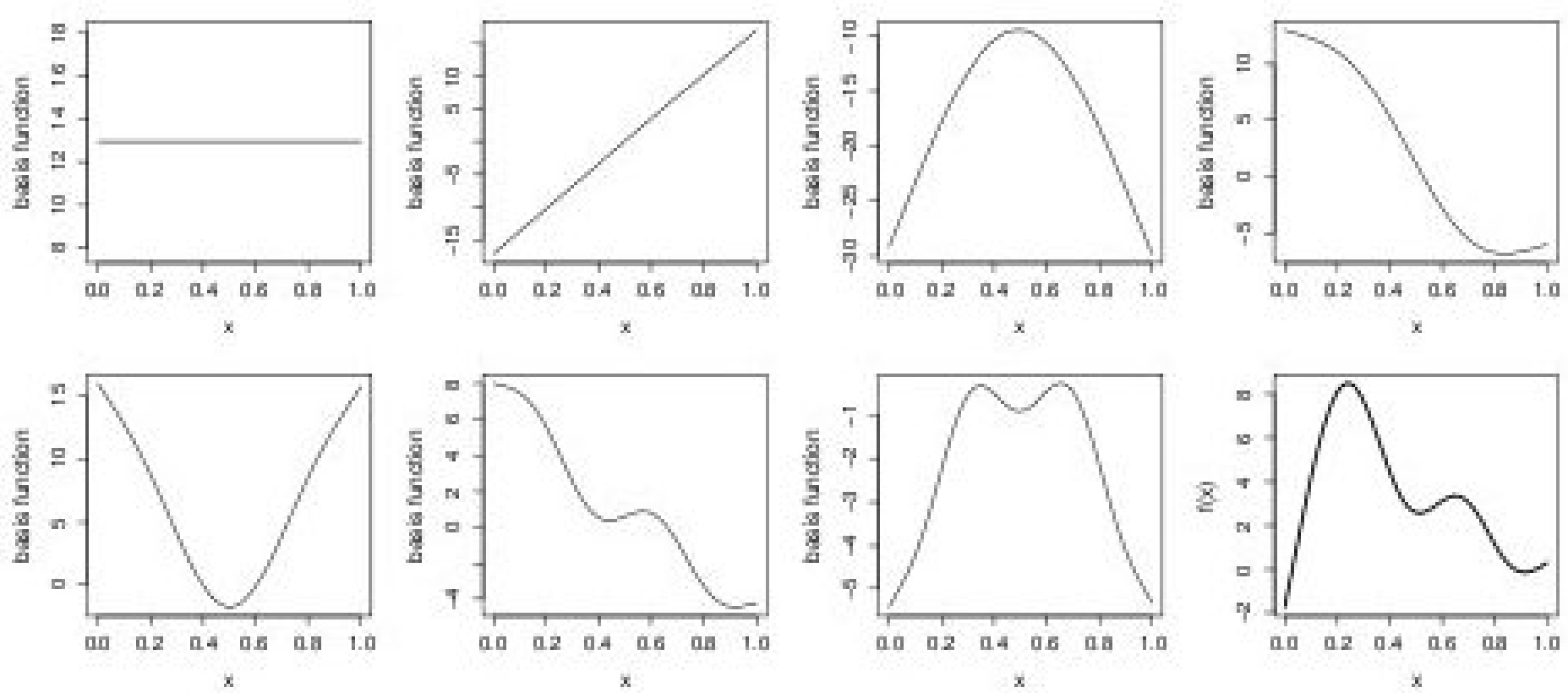
Splines cubiques de lissage s(. , bs ="cs")

Back



Splines thin-plate de lissage s(., bs = "tp")

Back



Splines de lissage

Critère à minimiser

$$\sum_{i}^{n}[y_i - \hat{f}(x_i)]^2 + \lambda \int_a^b [d^2\hat{f}(x)/dx^2]^2 dx$$

(fidélité aux données + régularité)

Ajout d'une pénalité qui lisse la fonction pour éviter les fluctuations trop grandes $\longrightarrow$ paramètre de lissage λ

Décomposition sur une base de fonctions : splines cubiques et thin plate.

$$\hat{f}(x_i) = \sum_{j=1}^{p+q} \theta_j S_j(x_i)$$

$\Longrightarrow$ proche de la régression.

Critère d'ajustement

Degrés de liberté (en régression n - p) $\rightarrow$ on cherche à s'en rapprocher

moyenne générale (p=1) ; interpolation, passe par tous les points (p = n)

df = n - tr(projecteur H) ; $\hat{y} = Sy$; "$H = S(S'S)^{-1}S'$"

- Utilisation de la valisation croisée (jackknife ou leave-one-out) et du PRESS (predicted sum of squares) pour la sélection du paramètre de lissage
- critère de comparaison de modèles (test sur les modèles) : analogie avec le paramétrique

Extension multidimensionnelle

Le modèle additif généralisé (gam = generalized additif model)

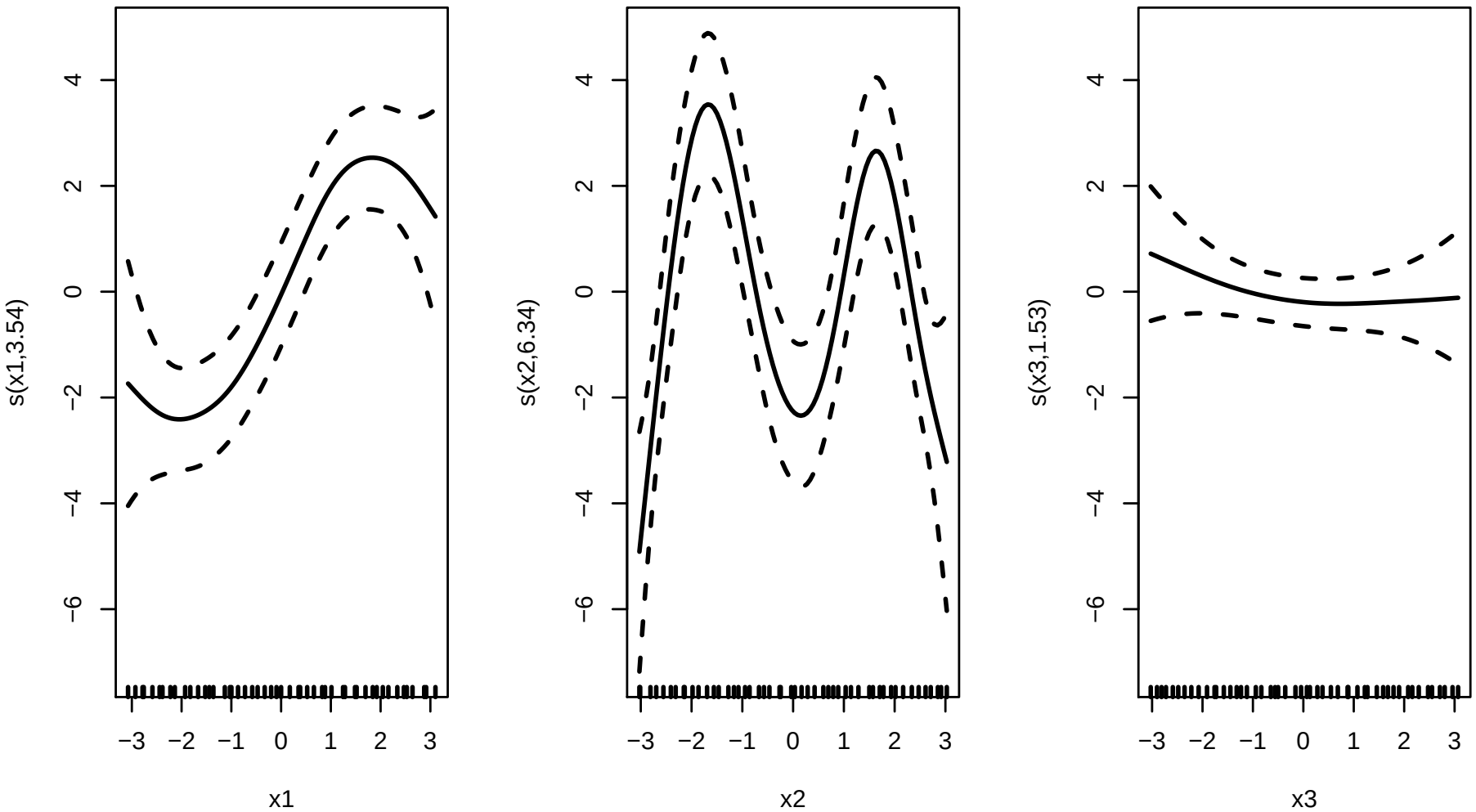
$$y_i = \sum_i^k f^{(j)}(x_{ij}) + \varepsilon_i$$

gam(res $\sim$ s(x1) + s(x2) + s(x3))

Choix de modèle, tests : similarité avec lm. Utilisation de anova, step.

Modèle Ishigami : modèle multiplicatif

Back



Extension multidimensionnelle

Le modèle additif généralisé (gam = generalized additif model)

$$y_i = \sum_i^k f^{(j)}(x_{ij}) + \varepsilon_i$$

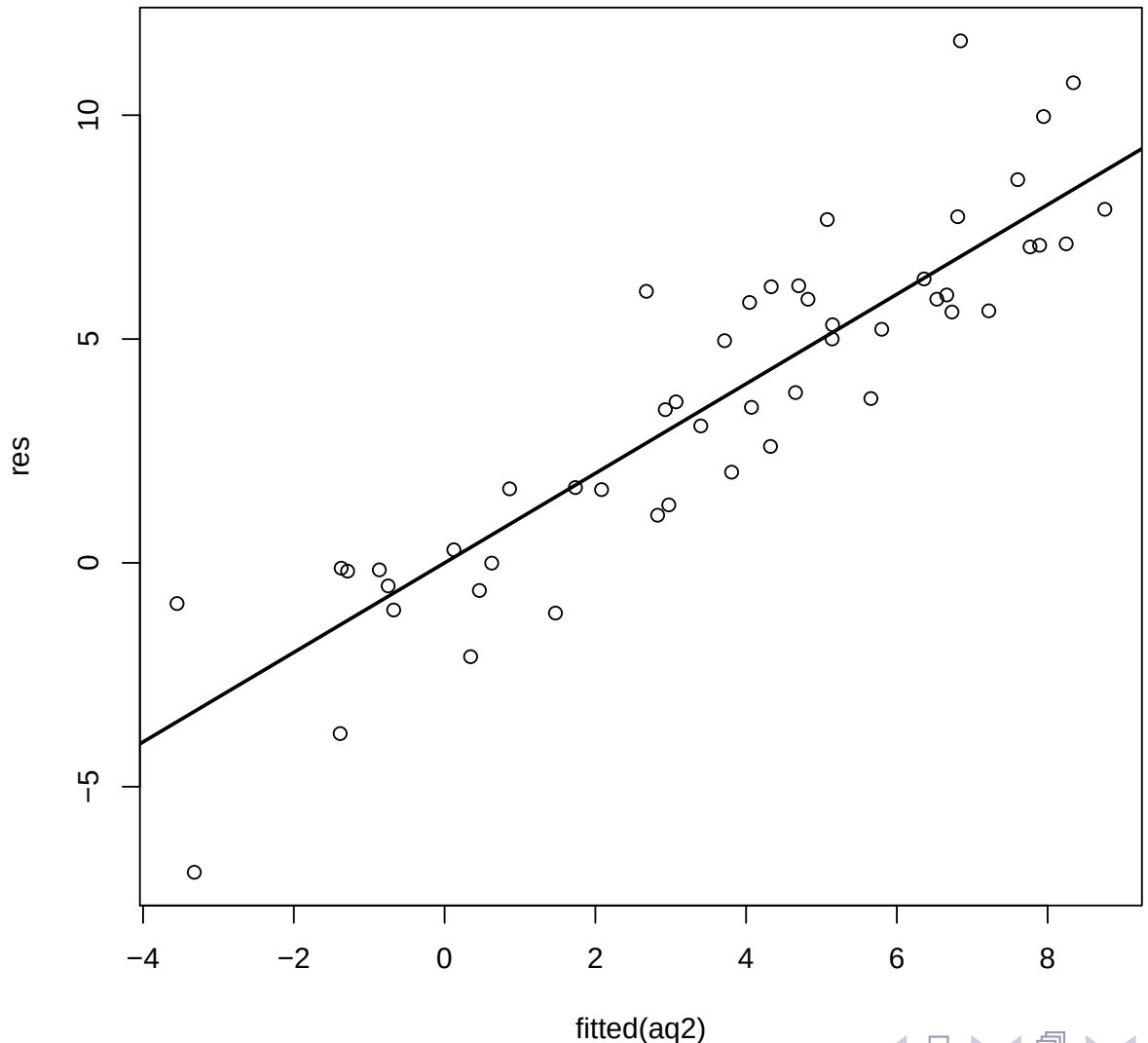
gam(res $\sim$ s(x1) + s(x2) + s(x3))

Choix de modèle, tests : similarité avec lm. Utilisation de anova, step.

fitted(res) vs res

Modèle Ishigami : ajustés vs observés

Back



Extension multidimensionnelle

Le modèle additif généralisé (gam = generalized additif model)

$$y_i = \sum_i^k f^{(j)}(x_{ij}) + \varepsilon_i$$

gam(res $\sim$ s(x1) + s(x2) + s(x3))

Choix de modèle, tests : similarité avec lm. Utilisation de anova, step.

fitted(res) vs res

Modèles collent aux données : importance si possible de valider les qualités prédictives sur un nouveau jeu de données

Plans d'expérience

Hyper-cube latin (à faible discrépance et un peu d'aléatoire) pour identifier (répartition des points sur chaque facteur)

Echantillonnage par méthode de quasi-Monte Carlo utilisant une suite de Sobol à discrépance faible.

Plan

Références

- Storlie et Helton (2008). Multiple predictor smoothing methods for sensitivity analysis : Description of techniques. *Reliability Engineering and Safety*, **93**, 28-54.
- Myers, Montgomery et Anderson-Cook (2009). Response Surface Methodology : Process and Product Optimization Using Designed Experiments, Wiley, 704p.
- Simon Wood (2006). Generalized Additive Models : an introduction with R. CRC/Chapman & Hall.
- Cours de B Govaerts sur les Plans d'expérience pour l'estimation de surfaces de réponse (sur la clé et le site).
- Présentation de Ch. Thomas-Agnan sur les Estimateurs splines (sur la clé et sur le site).

Licence