

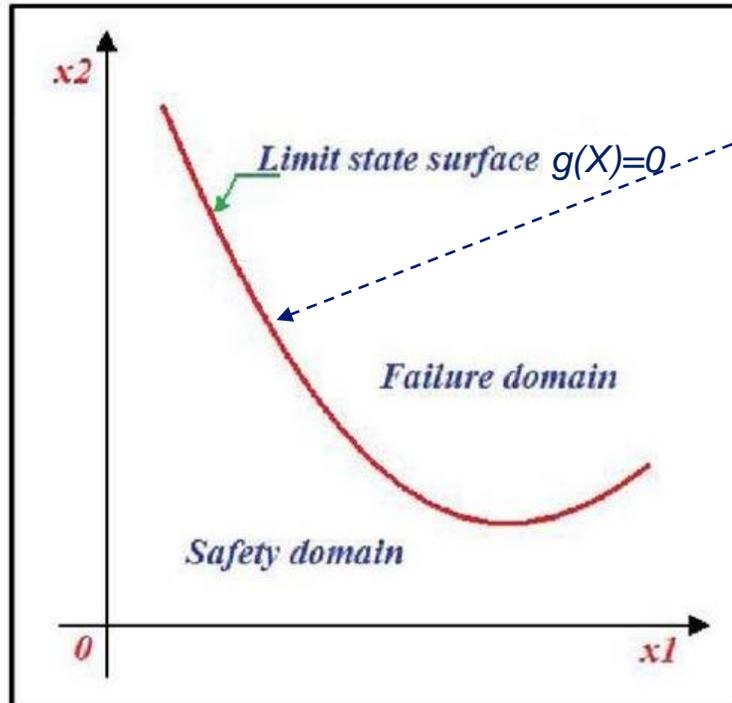
Groupe de travail « Garanties sur l'usage des méta-modèles »



Groupement d'intérêt scientifique
Quantification des incertitudes @ Université Paris-Saclay | LARTISSTE



Illustration : cadre « sûreté »



Surface d'état-limite Σ difficile à atteindre numériquement (par simulation), car g coûteux

Quel impact sur le calcul d'un **indicateur de sûreté** lorsqu'on remplace, totalement ou partiellement (ex : chaîne de calcul) g ou Σ par un méta-modèle (MM) ?

Indicateurs typiques de la sûreté
Probabilité d'appartenir au « failure domain »
Quantile associé
Etc.

VERROU 1 : RECHERCHE DE CONSERVATISME FIN

Probabilité de défaillance ($\sim 10^{-p}$) calculée par Monte Carlo via un MM \hat{g} de g

Proposition 1. Assume $q > \hat{p}_{d_n}$ and assume there exists $\alpha \in [0, 1[$ such that $P(E_{y_0}) \leq \alpha$. Denote

$$\beta = P(g(X) \geq \hat{g}(X) | \hat{g}(X) \geq y_0).$$

Then

p

$$p \leq \beta \hat{p}_{d_n} + \frac{(1 - \beta \hat{p}_{d_n})}{(2 - \hat{p}_{d_n} - q)} \left[\hat{p}_{d_n} (1 - q) + \frac{q\alpha(1 - \hat{p}_{d_n})}{q - \hat{p}_{d_n}} \right]. \quad (1)$$

Borne supérieure connue ($\sim 10^{-p+q}$)

"Vraie probabilité" issue de g ($\sim 10^{-p}$)

Contrôles du MM \hat{g}

$$E_{y_0} = \{\hat{g}(X) \geq g(X) \geq y_0\}$$

Comment améliorer / calculer cette borne supérieure, par ex avec des outils de concentration (cas iid et non iid) ?²

GARANTIES RECHERCHÉES PLUS GÉNÉRALEMENT

Aller au-delà des garanties asymptotiques (« faibles ») et de l'usage des théorèmes d'approximation universelle

$$\hat{h}_n(\hat{f}_m) \xrightarrow[n, m \rightarrow \infty]{a.s.} h(f)$$

Donner un usage opérationnel aux garanties de « bon comportement robuste » plus fines du type « concentration non asymptotique », dans des cadres plus sévères que la théorie classique (\neq données iid)

$$P\left(\left|\hat{h}_n(\hat{f}_m) - h(f)\right| > \varepsilon\right) \leq A_{n,m,\varepsilon}$$

Conférer aux techniques variationnelles des garanties de conservatisme

$$\pi_2 = \arg \min_{\pi \in \mathcal{A}} \mathcal{D}(\pi_1, \pi) \text{ sous la contrainte du type } \hat{h}_{\pi_1} \leq \hat{h}_{\pi_2} \text{ (fonction d'intérêt)}$$

Choix de discrédance

Distribution-cible difficilement atteignable

Distribution candidate issue de l'usage de méta-modèle(s)

Autre : les conclusions obtenues par analyse de sensibilité doivent être similaires, etc.

Codes simples



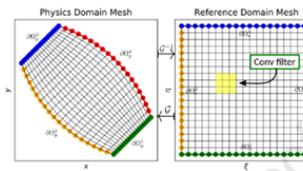
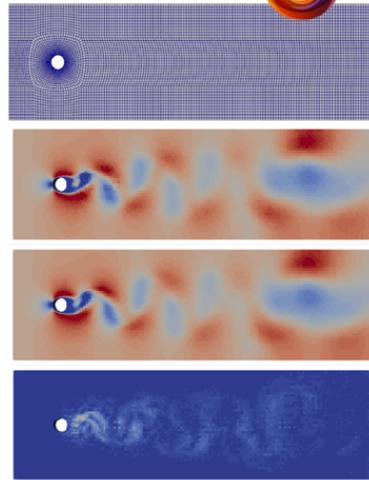
Codes complexes et chaînes de codes

Effets séparés et intégraux

PREALABLE POUR ABOUTIR A LA VALIDATION OPERATIONNELLE (SI LA PERFORMANCE EST BONNE)

EX : PHYSICS-INSPIRED DEEP LEARNING

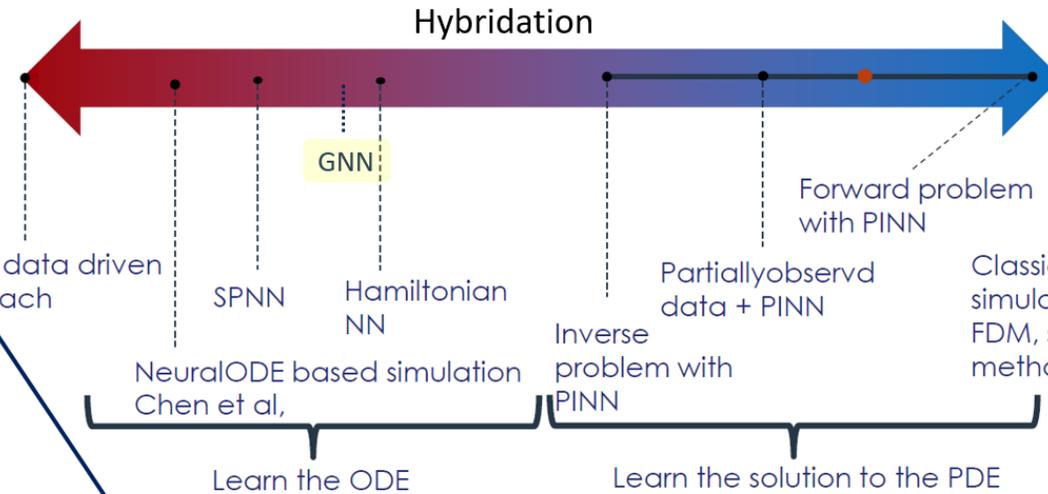
Maillage irrégulier, avec transition entre régimes laminaire et tourbillonnaire



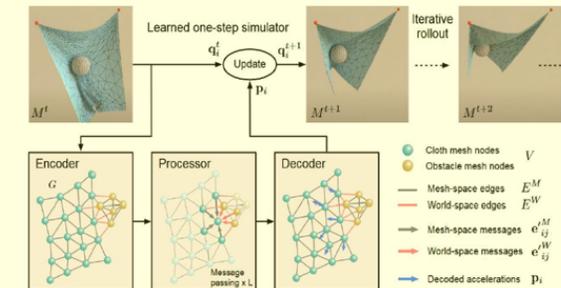
- Verrous**
- Réussir les déformations homéomorphiques
 - Hybrider avec l'approche PINN + ROM
 - Réentraînement avec changement de maillage
 - Vérifier la satisfaction des contraintes physiques
 - Intégrer les conditions de bord
 - Gestion grande dimension

Data

Physics knowledge



GNN = Graph Neural Networks
(réseaux convolutionnels hiérarchiques opérant sur des graphes)

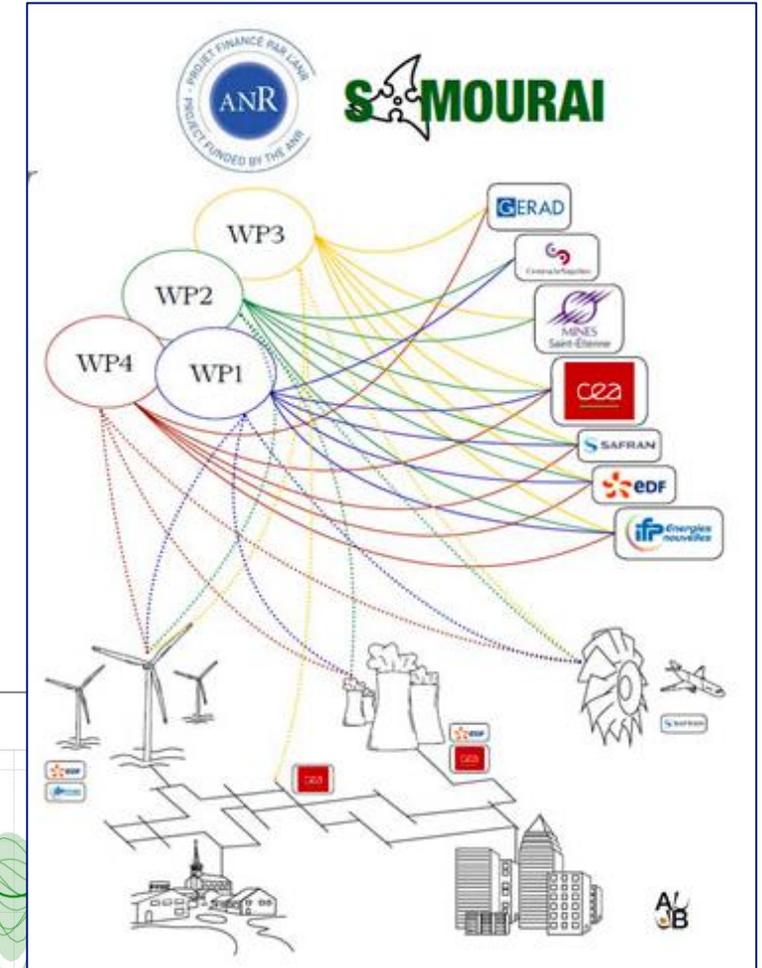
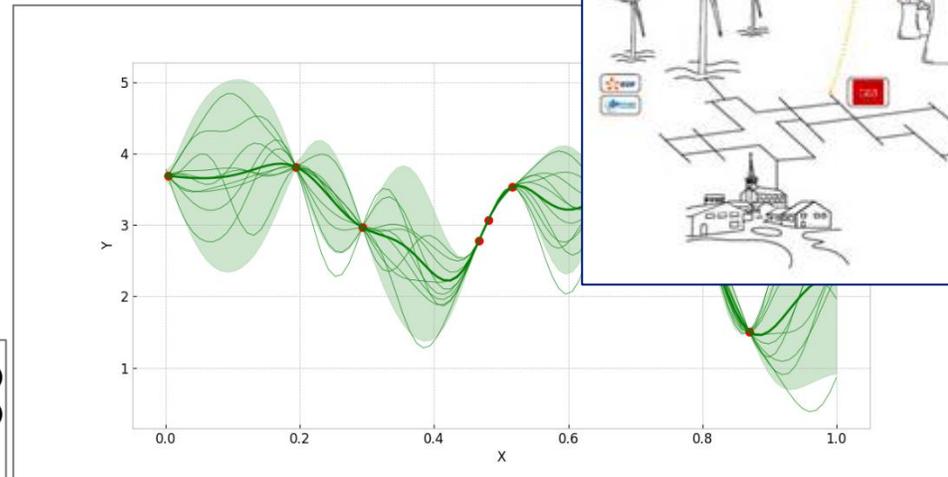
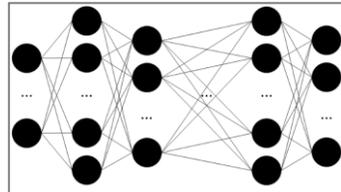


APARTÉ SUR LE CHOIX ET LA PERFORMANCES DE MÉTA-MODÈLES

Les travaux du projet **ANR SAMOURAI (2022-2026)** sont « versés » dans le GIS (direction : IFPEN)

- Construire des méta-modèles adaptés à la grande dimension ($d \sim 100$) dans un contexte « code coûteux »
- Produire des stratégies d'enrichissement
- Considérer des problèmes à variables d'entrée mixtes : continues, ordinales, nominales
- Gérer les difficultés de calcul en optimisation et simulation

Les travaux sur les RN bayésiens (entre autres) concourent à accroître les outils de méta-modélisation



VERROU 2 : SÉPARATION ET GESTION DIFFÉRENCIÉE DES INCERTITUDES

- Améliorer les règles formelles de modélisation des **incertitudes épistémiques** (relatives à la connaissance implémentable des phénomènes)
- Résoudre les problèmes d'**identifiabilité des incertitudes** dans les problèmes d'inversion, de calage et d'assimilation de données

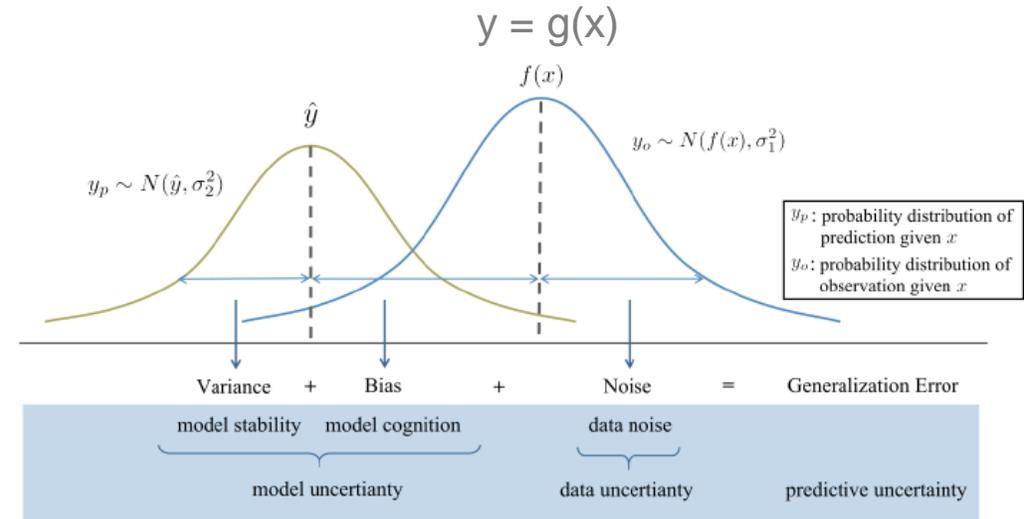


Figure: Decomposition of uncertainty in supervised learning into model uncertainty (epistemic) and data uncertainty (aleatoric).

Assume to have observations $y_n^* = (y_i^*)_{i \in \{1, \dots, n\}}$ of Y^* such that

$$Y^* = Y + \varepsilon, \quad (1)$$

$$Y = g(X, d) \quad (2)$$

where

- ▶ Y lives in \mathbf{R}^q
- ▶ X is a p -dimensional random variable of unknown distribution \mathcal{F} supported over \mathbf{R}^p
- ▶ d are environmental parameters (e.g., forcings)
- ▶ ε is a (experimental or/and process) noise with assumed distribution $\mathcal{N}_q(0, \Sigma)$

Stochastic inversion (in a broad sense): Inferring on the features of \mathcal{F} from the knowledge of y_n and Σ

Extracted from Zhou X. et al. A Survey on Epistemic (Model) Uncertainty in Supervised Learning: Recent Advances and Applications. arXiv:2111.01968 [cs] (2021).

- Leoni (202). Inférence bayésienne de l'erreur de modèle pour la calibration de codes CFD. Thèse CEA/INRIA Saclay
- Spaggiari, Segond, Lefebvre (2022). Evolution of Fuel Cycle Reload Safety Analysis with Machine Learning - Illustration on the Rod Ejection Accident. Physor Conference.
- Cocci et al. (2022). A comprehensive Bayesian framework for the development, validation and uncertainty quantification of thermal-hydraulic models. Annals of Nuclear Energy

EXEMPLE : GÉNÉRATION DE DONNÉES

Reconstruction de vraisemblances statistiques par modèles de génération de données (GAN, VAE, diffusion normalizing flows, etc.) ► [inversion de code](#)

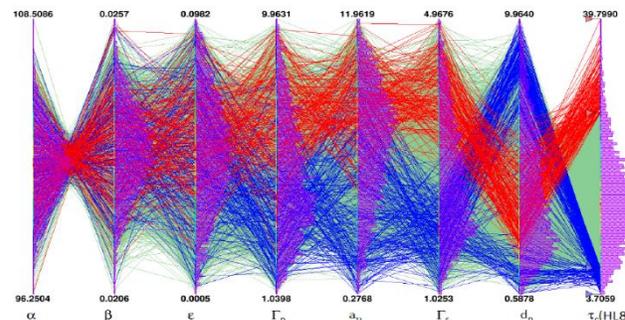
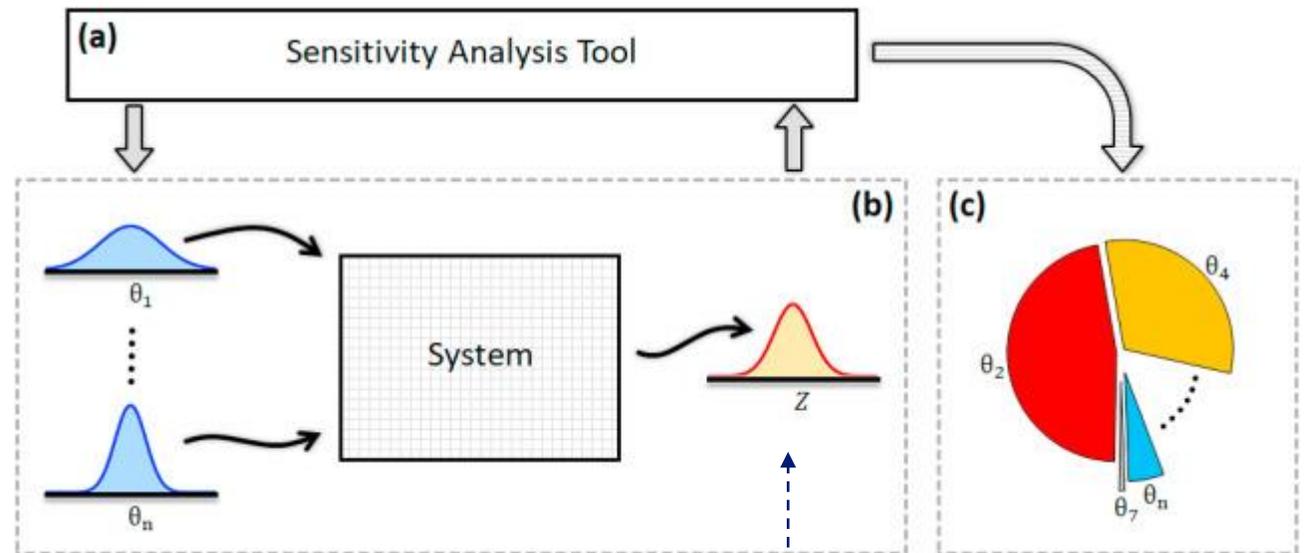


Figure: Argouarc'h E., Desbouvries F., Barat E., **E.K.** & Dautremer T. Discretely Indexed Flows. arXiv:2204.01361 [cs, stat] (2022).

Quelles sélection et adaptation d'approches par apprentissage pour éviter les vraisemblances « non physiques », à différentes échelles ?

VERROU 3 : ANALYSER LA SENSIBILITÉ / ROBUSTESSE DE SCÉNARIOS SPÉCIFIQUES

- Comment définir des **indicateurs interprétables de la sensibilité et la robustesse** de $Y=g(X)$ pour des situations X redoutées / souhaitées (*fortes corrélations*) ?
- Problématique partagée avec l'IA explicable
- **Comment sélectionner et manipuler des données informatives pour ce type d'indicateurs ?**
- **Quantile-constrained Wasserstein projections for robust interpretability of numerical and machine learning models** Idrissi et al. (2022)
- **Kernel herding** Chen et al. (2012), Lacoste-Julien et al. (2015)..
- **Maximum Mean Discrepancy**, etc. Pronzato et al. (2021)



Sous-domaine des sorties important pour la sûreté ou la conception