



**Réseaux de neurones et modèles de mélange  
avec le logiciel Neuro One**

**patrice.kiener@inmodelia.com**

**Tel : +33.9.53.45.07.38**

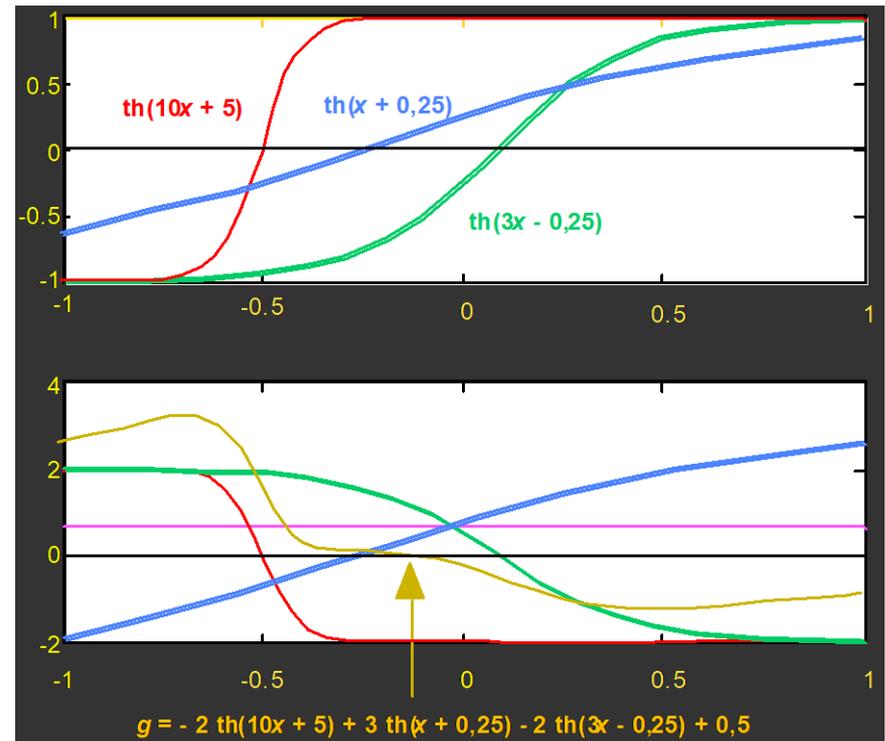
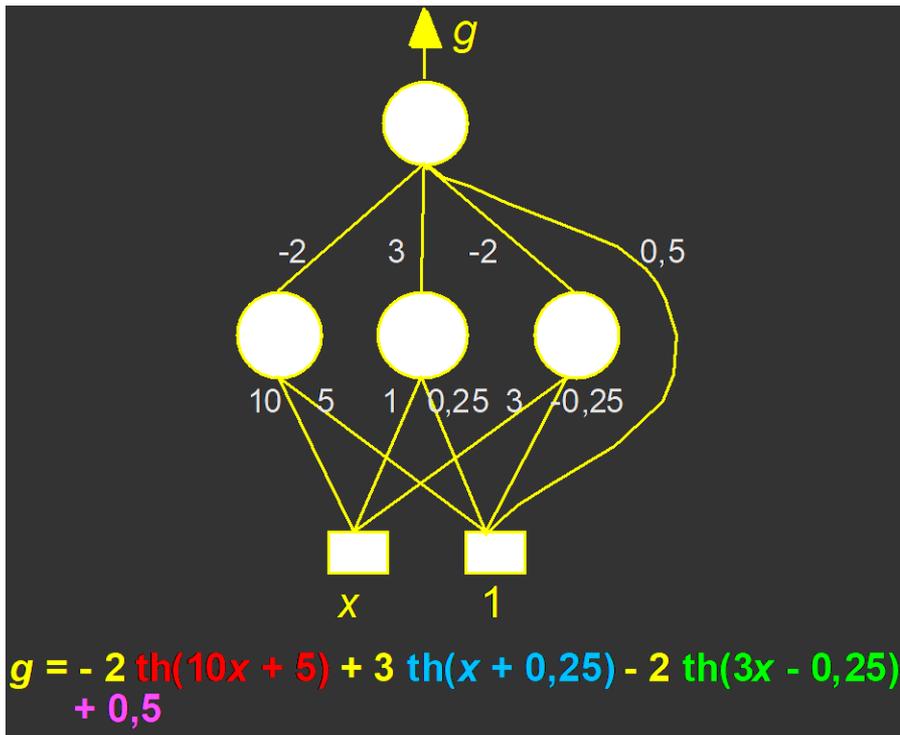
**Paris – 16 septembre 2019**

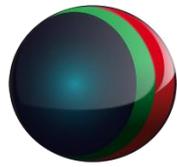


# Qu'est-ce qu'un réseaux de neurones ?

Une combinaison de plusieurs neurones

Classiquement :  
une couche d'entrées  
une couches de neurones non-linéaires  
une couche de sortie

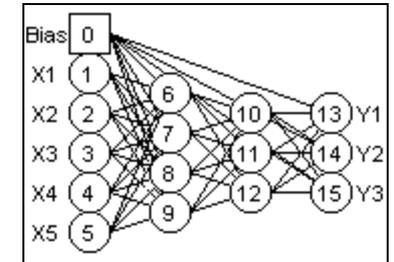
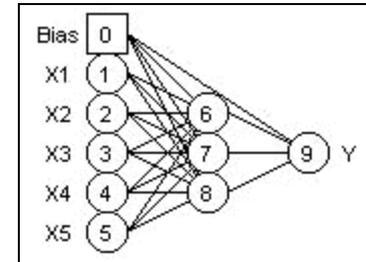




# Quelques exemples de RN

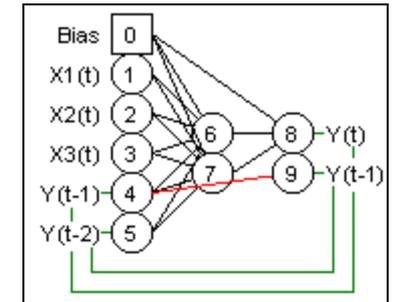
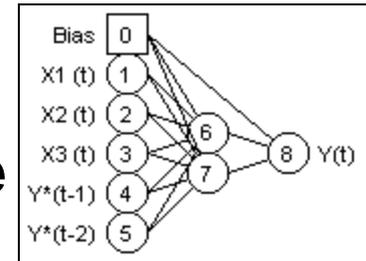
## RN statiques :

- une couche cachée
- plusieurs couches cachées



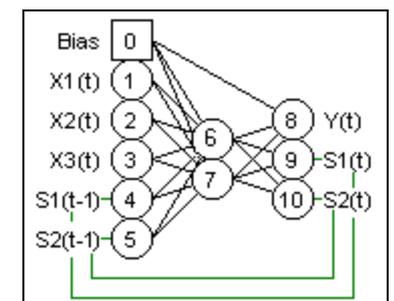
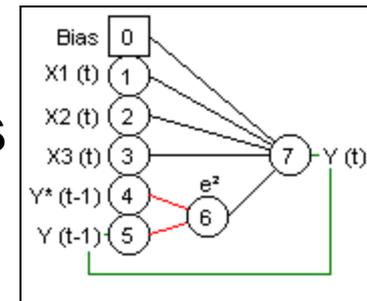
## RN pour séries chronologiques :

- RN statiques
- RN dynamiques sortie / entrée
- RN dynamiques d'état



## RN hybrides :

- mélange RN boîte noire plus modèle de connaissance (ici GARCH)



Pour chaque modèle, il y a une formule non-linéaire !!



# Modèles de mélange :

## 1 degré de liberté en moins - solution 1

**Mélange**

$$\sum_{i=1}^m X_i = 100$$

**Neurone classique :**

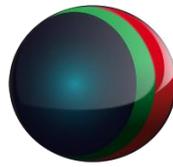
$$z = th(b_0 + b_1 X_1 + .. + b_m X_m)$$

**Contrainte :**

$$\begin{aligned} z &= th(b_0 + b_1 X_1 + .. + b_m X_m) \\ &= th\left(\frac{b_0}{100} \sum_1^m X_i + b_1 X_1 + .. + b_m X_m\right) \\ &= th((b_1 + 0.01b_0)X_1 + .. + (b_m + 0.01b_0)X_m) \\ &= th(c_1 X_1 + .. + c_m X_m) \end{aligned}$$

**Neurone de mélange :**  
**(0 C<sup>ste</sup>, m entrées)**

$$z = th(c_1 X_1 + .. + c_m X_m)$$



# Modèles de mélange :

## 1 degré de liberté en moins - solution 2

**Mélange**

$$X_m = 100 - \sum_{i=1}^{m-1} X_i$$

**Neurone classique :**

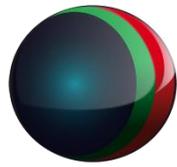
$$z = th(b_0 + b_1 X_1 + .. + b_m X_m)$$

**Contrainte :**

$$\begin{aligned} z &= th(b_0 + b_1 X_1 + .. + b_m X_m) \\ &= th(b_0 + b_1 X_1 + .. + b_{m-1} X_{m-1} + b_m (100 - \sum_{i=1}^{m-1} X_i)) \\ &= th((b_0 + 100b_m) + (b_1 - b_m) X_1 + .. + (b_{m-1} - b_m) X_{m-1}) \\ &= th(d_0 + d_1 X_1 + .. + d_{m-1} X_{m-1}) \end{aligned}$$

**Neurone de mélange :**  
**(C<sup>ste</sup>, m-1 entrées)**

$$z = th(d_0 + d_1 X_1 + .. + d_{m-1} X_{m-1})$$

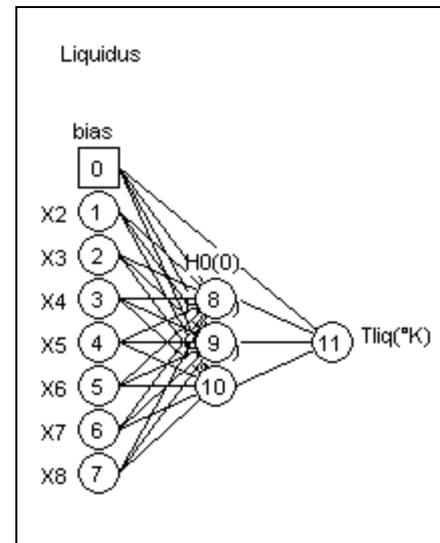
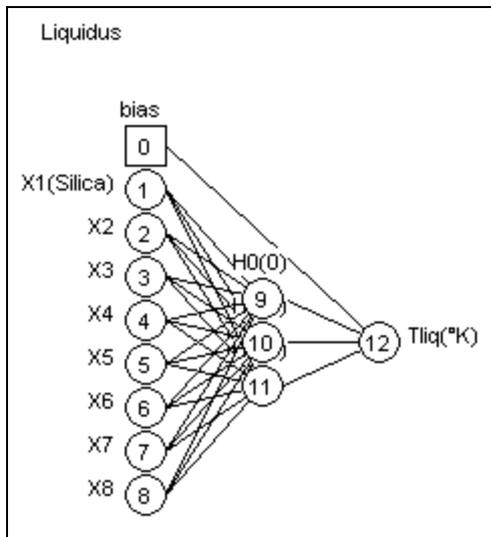


# RN pour modèles de mélange

Les deux descriptions sont équivalentes !

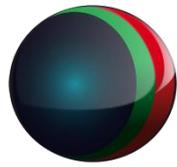
$$z = th(c_1 X_1 + .. + c_m X_m)$$

$$z = th(d_0 + d_1 X_1 + .. + d_{m-1} X_{m-1})$$



Même nombre de coefficients / degrés de liberté

- Les apprentissages avec  $m$  entrées convergent toujours
- Le calcul inverse est plus facile avec  $m-1$  entrées



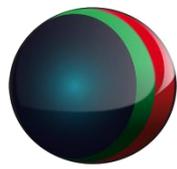
# Exemple : Jeu de données Céramique

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
	Blend code	Coarse1	Medium1	Fine1	Coarse	Medium	Fine	Porosity	
1	4	40	40	20	0,40	0,40	0,20	28,8	
2	44	70	30	0	0,70	0,30	0,00	31,9	
3	20	50	0	50	0,50	0,00	0,50	32,8	
4	42	30	70	0	0,30	0,70	0,00	37,4	
5	62	10	0	90	0,10	0,00	0,90	44,3	← Max
6	25	70	0	30	0,70	0,00	0,30	28,9	
7	34	20	20	60	0,20	0,20	0,60	35,9	
8	55	10	10	80	0,10	0,10	0,80	40,9	
9	6	50	10	40	0,50	0,10	0,40	29,4	
10	12	50	40	10	0,50	0,40	0,10	27,2	
11	22	20	30	50	0,20	0,30	0,50	35,1	
12	47	0	30	70	0,00	0,30	0,70	31,6	
13	7	40	20	40	0,40	0,20	0,40	29,2	
14	48	30	0	70	0,30	0,00	0,70	38,6	
15	14	20	50	30	0,20	0,50	0,30	29,8	
16	15	30	50	20	0,30	0,50	0,20	31,9	
17	23	10	40	50	0,10	0,40	0,50	32,9	
18	39	0	70	30	0,00	0,70	0,30	34,9	
19	10	50	30	20	0,50	0,30	0,20	26,4	
20	17	60	20	20	0,60	0,20	0,20	24,7	← Min
21	24	0	50	50	0,00	0,50	0,50	35,8	
22	Test								
23	29	20	60	20	0,20	0,60	0,20	33	
24	3	30	40	30	0,30	0,40	0,30	30,3	
25	51	10	80	10	0,10	0,80	0,10	40,4	
26	8	30	30	40	0,30	0,30	0,40	30,5	
27	9	20	40	40	0,20	0,40	0,40	32,1	
28	1	40	30	30	0,40	0,30	0,30	27,8	
29	54	90	0	10	0,90	0,00	0,10	33,8	
30	18	50	50	0	0,50	0,50	0,00	32,9	
31	33	30	10	60	0,30	0,10	0,60	36	
32	49	80	10	10	0,80	0,10	0,10	25,8	
33									
34									
35									

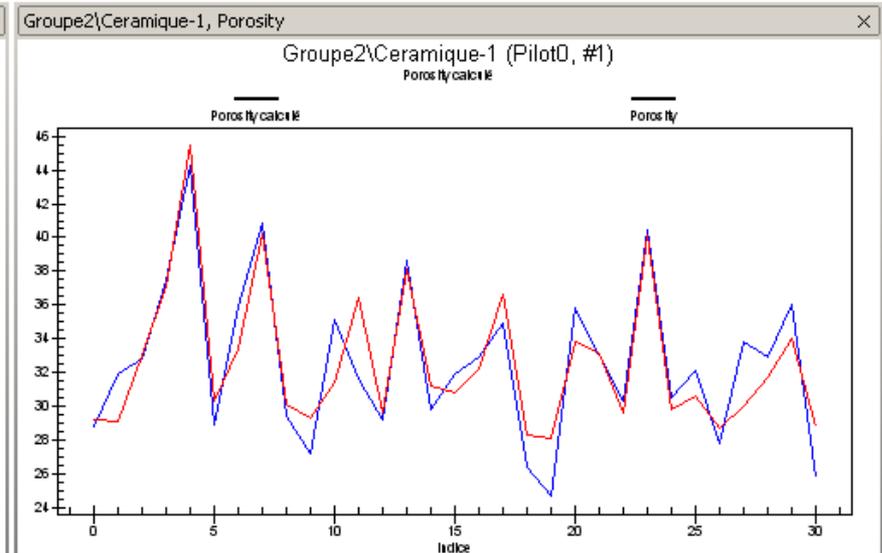
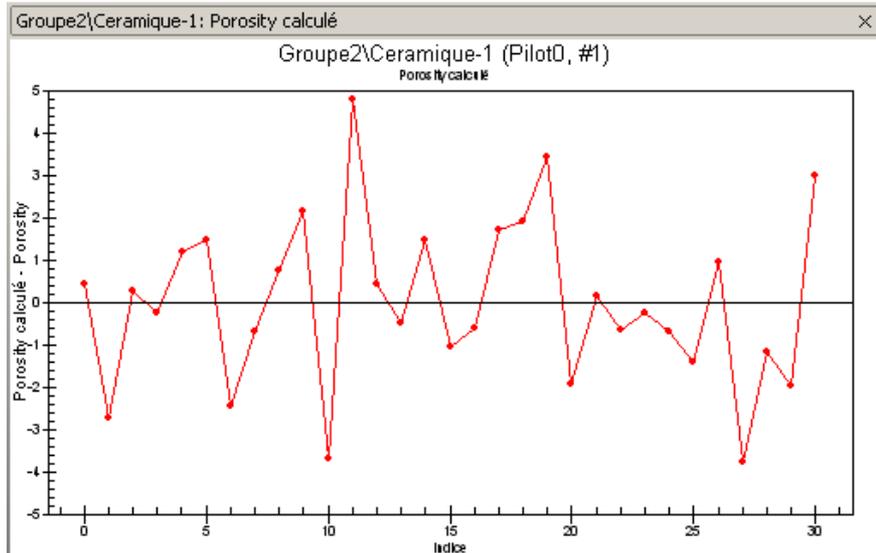
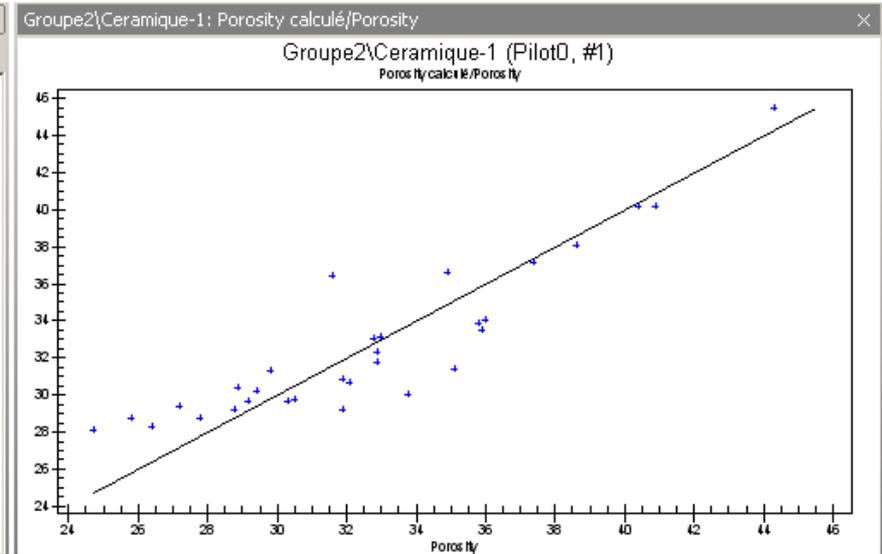
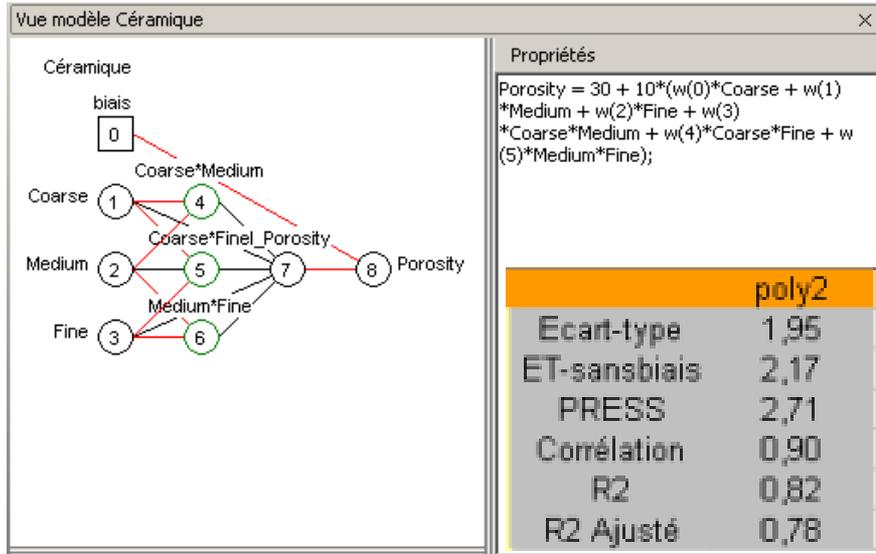
une  
faute  
!

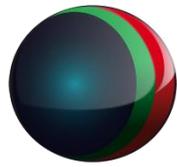
Max

Min

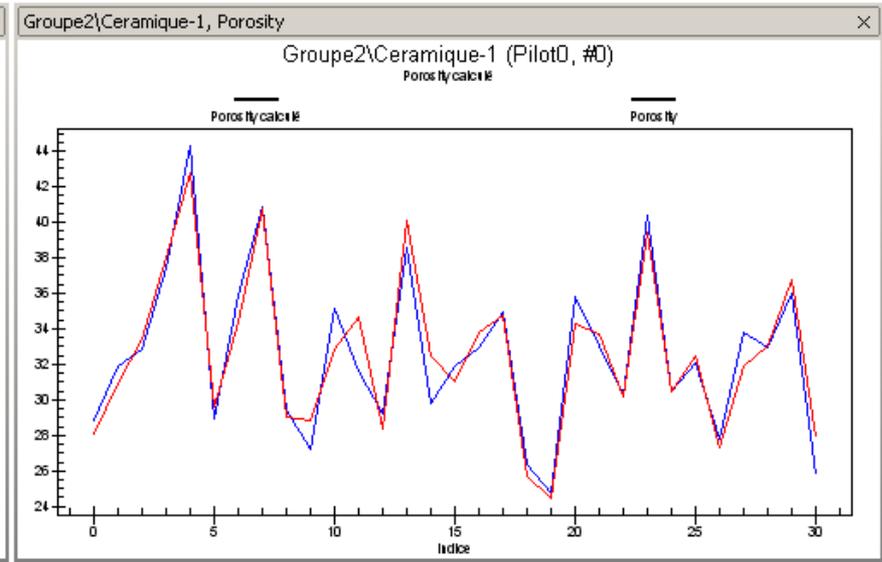
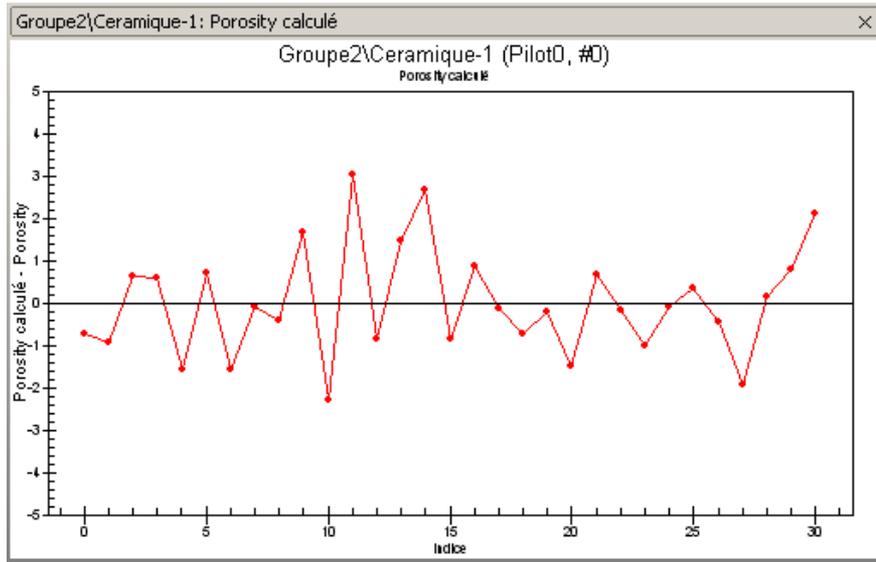
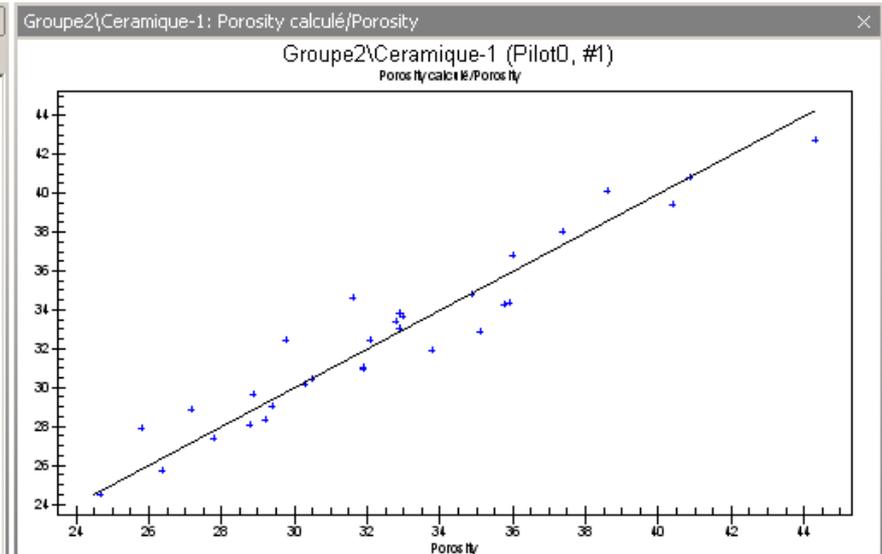
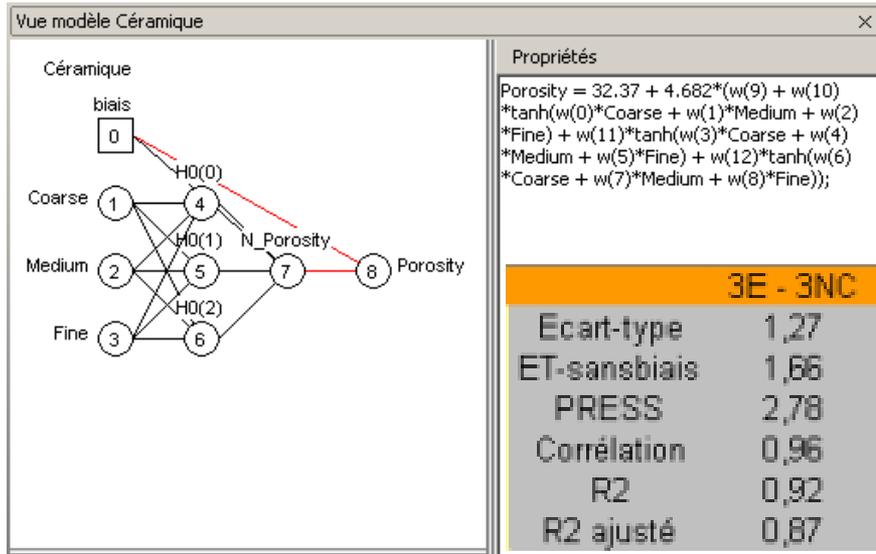


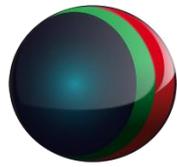
# Céramique : Modèle polynomial (6 coefficients)





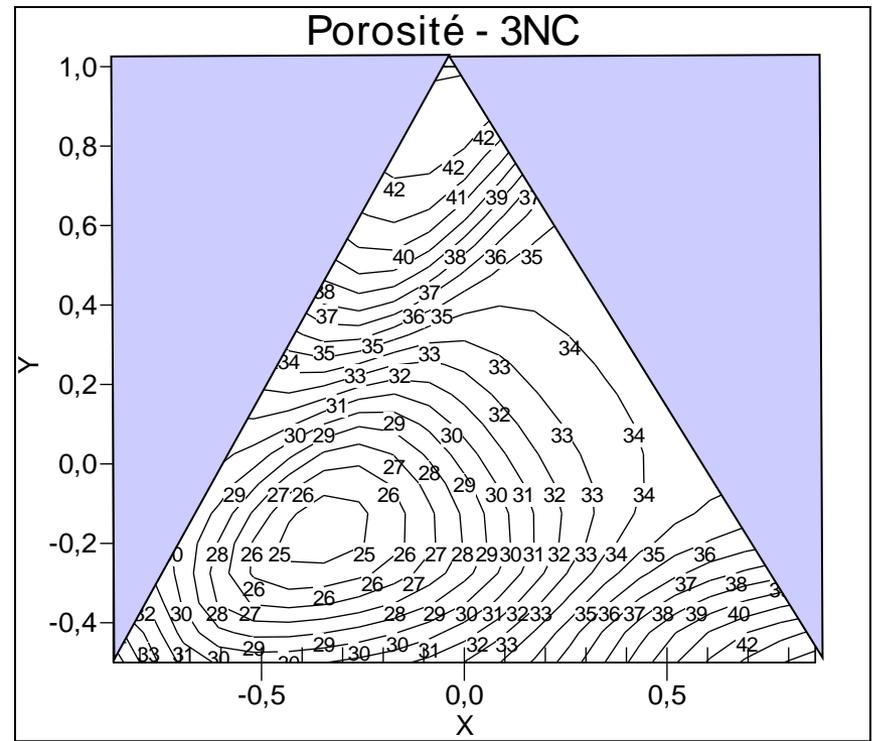
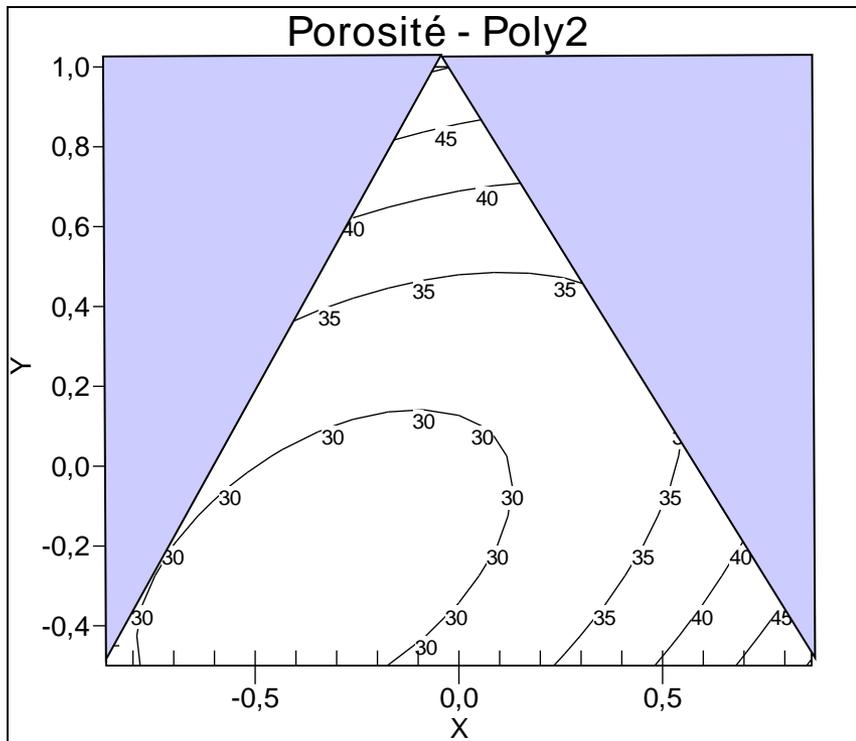
# Céramique : RN à 3 neurones cachés (13 coefficients)





# Céramique : Courbes d'isoréponses

## Polynôme ordre 2 – RN à 3 neurones cachés





# Céramique : Fonction de désirabilité

## Modèle polynomial

**ENTREES**

Valeur  $d(\text{Porosity})/dx$

Coarse: 0 to 0.9, Value: 0.602, Derivative: -12.401

Medium: 0 to 0.8, Value: 0.225, Derivative: -12.37

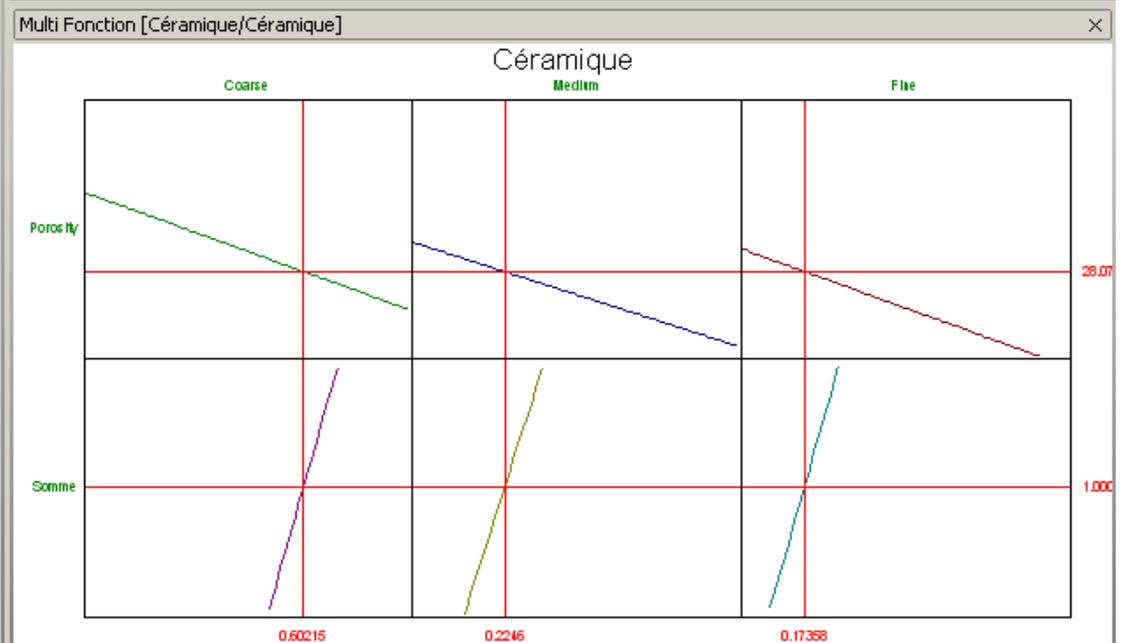
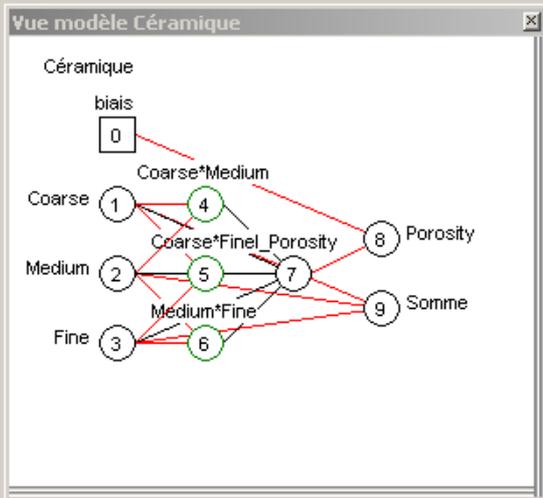
Fine: 0 to 0.9, Value: 0.174, Derivative: -12.378

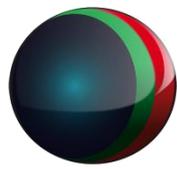
**SORTIES**

Désirabilité globale: 0.481

Porosity	Confiance	Désirabilité
28.075	1.184	0.481

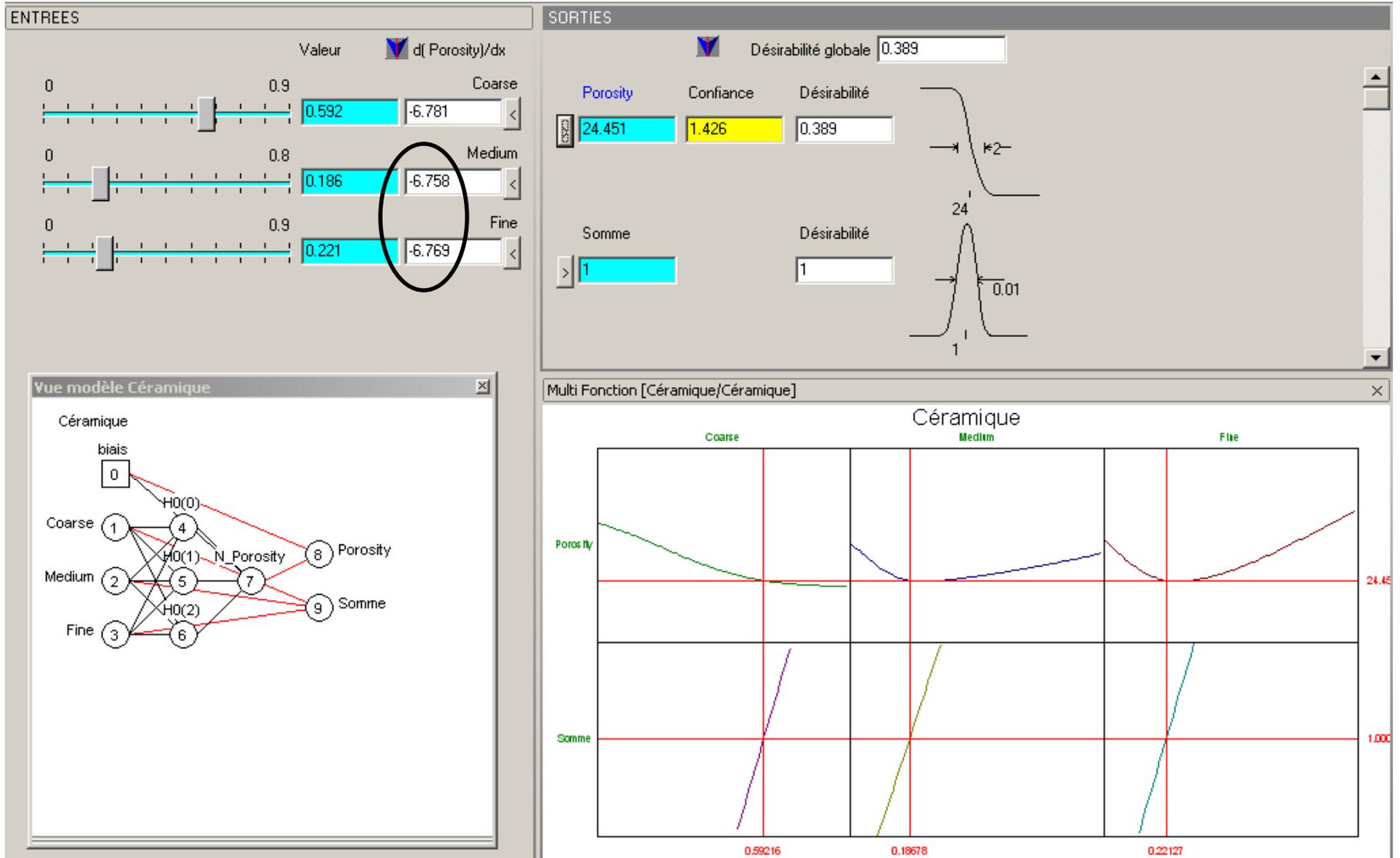
Somme: 1, Désirabilité: 0.999

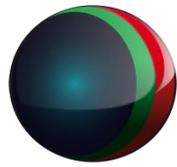




# Céramique : Fonction de désirabilité

## RN à 3 neurones cachés

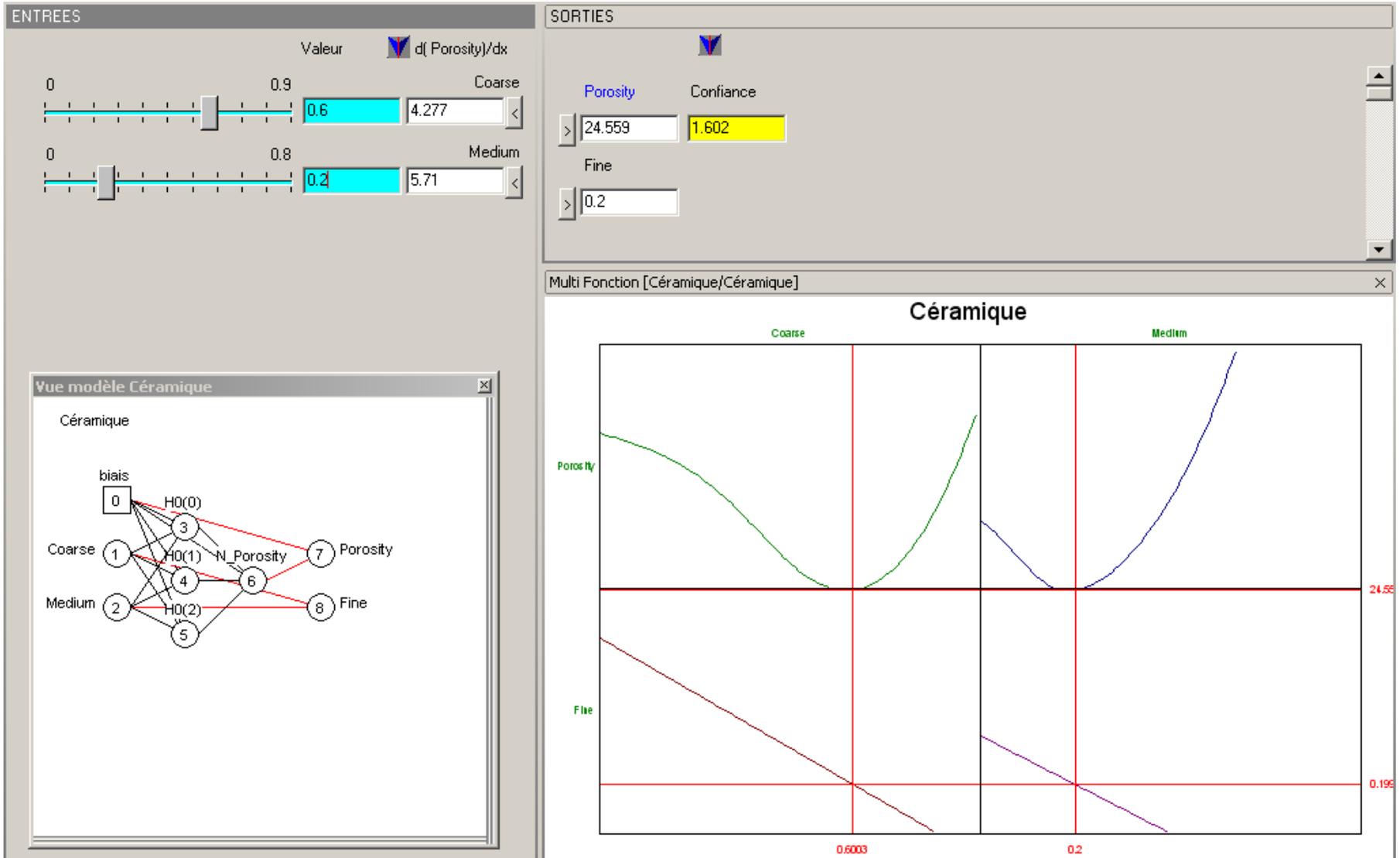


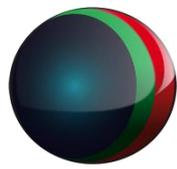


# Céramique : Fonction de désirabilité

## RN à 3 neurones cachés – solution 2

### Plus petite valeur (0,6 ; 0,2 ; 0,2) -> 24,6

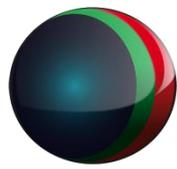




# Céramique : Prédictions

## Modèle polynomial

Fichier Edition Affichage Insertion Format Outils Données Fenêtre ? Acrobat													
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1							Modèle polynomial						
2	LINE	Coarse	Medium	Fine	Porosity	Somme	Calcul	Residu	Confiance	Levier	Residu_L	Ecart-type	1,95
3	1	0,4	0,4	0,2	28,8	1	29,21	0,41	1,17	0,08	0,44	ET-sansbiais	2,17
4	2	0,7	0,3	0	31,9	1	29,17	-2,73	2,18	0,29	-3,83	PRESS	2,71
5	3	0,5	0	0,5	32,8	1	33,06	0,26	2,02	0,25	0,34	Corrélation	0,90
6	4	0,3	0,7	0	37,4	1	37,12	-0,28	2,33	0,33	-0,41	R2	0,82
7	5	0,1	0	0,9	44,3	1	45,47	1,17	2,89	0,51	2,40	R2 Ajusté	0,78
8	6	0,7	0	0,3	28,9	1	30,37	1,47	1,99	0,24	1,93		
9	7	0,2	0,2	0,6	35,9	1	33,45	-2,45	1,15	0,08	-2,67		
10	8	0,1	0,1	0,8	40,9	1	40,20	-0,70	1,97	0,24	-0,92		
11	9	0,5	0,1	0,4	29,4	1	30,16	0,76	1,44	0,13	0,87		
12	10	0,5	0,4	0,1	27,2	1	29,35	2,15	1,44	0,13	2,46		
13	11	0,2	0,3	0,5	35,1	1	31,40	-3,70	1,16	0,08	-4,03		
14	12	0	0,3	0,7	31,6	1	36,39	4,79	2,18	0,29	6,75		
15	13	0,4	0,2	0,4	29,2	1	29,61	0,41	1,22	0,09	0,45		
16	14	0,3	0	0,7	38,6	1	38,09	-0,51	1,95	0,23	-0,66		
17	15	0,2	0,5	0,3	29,8	1	31,25	1,45	1,12	0,08	1,57		
18	16	0,3	0,5	0,2	31,9	1	30,82	-1,08	1,12	0,08	-1,17		
19	17	0,1	0,4	0,5	32,9	1	32,28	-0,62	1,44	0,13	-0,71		
20	18	0	0,7	0,3	34,9	1	36,62	1,72	2,33	0,33	2,57		
21	19	0,5	0,3	0,2	26,4	1	28,31	1,91	1,17	0,08	2,08		
22	20	0,6	0,2	0,2	24,7	1	28,12	3,42	1,17	0,08	3,73		
23	21	0	0,5	0,5	35,8	1	33,87	-1,93	2,03	0,25	-2,57		
24	22	0,2	0,6	0,2	33	1	33,15	0,15	1,25	0,10	0,17		
25	23	0,3	0,4	0,3	30,3	1	29,64	-0,66	1,12	0,08	-0,71		
26	24	0,1	0,8	0,1	40,4	1	40,14	-0,26	2,78	0,47	-0,49		
27	25	0,3	0,3	0,4	30,5	1	29,78	-0,72	1,15	0,08	-0,78		
28	26	0,2	0,4	0,4	32,1	1	30,67	-1,43	1,17	0,08	-1,56		
29	27	0,4	0,3	0,3	27,8	1	28,75	0,95	1,16	0,08	1,04		
30	28	0,9	0	0,1	33,8	1	30,02	-3,78	2,92	0,52	-7,84		
31	29	0,5	0,5	0	32,9	1	31,72	-1,18	2,03	0,25	-1,58		
32	30	0,3	0,1	0,6	36	1	34,01	-1,99	1,34	0,11	-2,24		
33	31	0,8	0,1	0,1	25,8	1	28,78	2,98	1,99	0,24	3,93		
34								1,95					
35							Ecart-type des résidus						



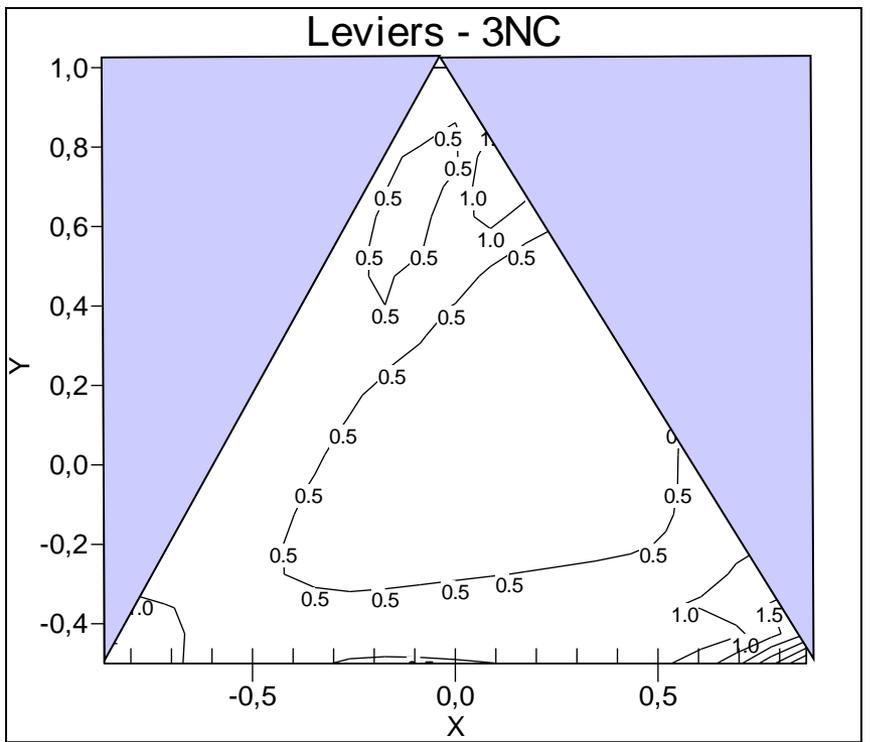
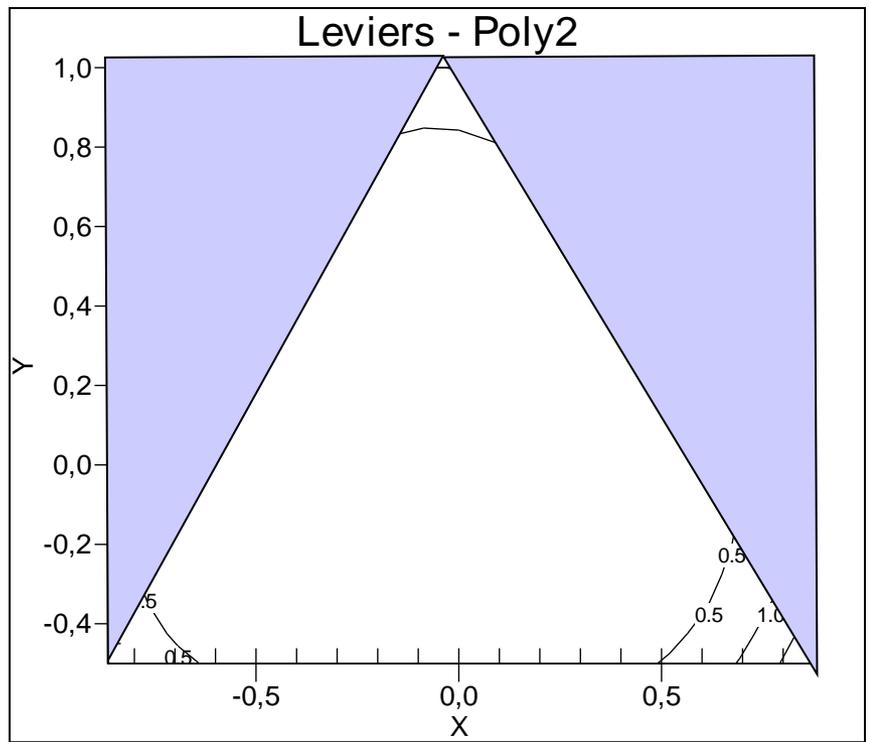
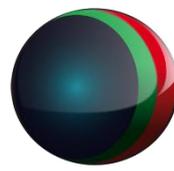
# Céramique : Prédictions

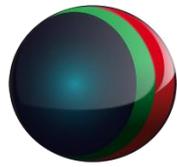
## RN à 3 neurones cachés

Fichier Edition Affichage Insertion Format Outils Données Fenêtre ? Acrobat													
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1							Modèle 3 entrées - 3 neurones cachés						3E - 3NC
2	LINE	Coarse	Medium	Fine	Porosity	Somme	Calcul	Residus	Confiance	Leviers	Residus_L	Ecart-type	1,27
3	1	0,4	0,4	0,2	28,8	1	28,07	-0,73	1,27	0,23	-0,94	ET-sansbiais	1,66
4	2	0,7	0,3	0	31,9	1	30,97	-0,93	2,08	0,61	-2,36	PRESS	2,78
5	3	0,5	0	0,5	32,8	1	33,40	0,60	1,75	0,43	1,06	Corrélation	0,96
6	4	0,3	0,7	0	37,4	1	37,99	0,59	2,32	0,75	2,42	R2	0,92
7	5	0,1	0	0,9	44,3	1	42,71	-1,59	2,10	0,62	-4,17	R2 ajusté	0,87
8	6	0,7	0	0,3	28,9	1	29,59	0,69	2,42	0,82	3,91		
9	7	0,2	0,2	0,6	35,9	1	34,34	-1,56	1,71	0,41	-2,66		
10	8	0,1	0,1	0,8	40,9	1	40,79	-0,11	2,19	0,68	-0,34		
11	9	0,5	0,1	0,4	29,4	1	29,00	-0,40	2,00	0,56	-0,92		
12	10	0,5	0,4	0,1	27,2	1	28,84	1,64	2,05	0,59	4,03		
13	11	0,2	0,3	0,5	35,1	1	32,82	-2,28	1,08	0,16	-2,73		
14	12	0	0,3	0,7	31,6	1	34,63	3,03	1,40	0,27	4,18		
15	13	0,4	0,2	0,4	29,2	1	28,33	-0,87	1,38	0,27	-1,19		
16	14	0,3	0	0,7	38,6	1	40,08	1,48	1,96	0,54	3,20		
17	15	0,2	0,5	0,3	29,8	1	32,46	2,66	1,06	0,16	3,16		
18	16	0,3	0,5	0,2	31,9	1	31,03	-0,87	1,27	0,23	-1,13		
19	17	0,1	0,4	0,5	32,9	1	33,78	0,88	1,17	0,19	1,09		
20	18	0	0,7	0,3	34,9	1	34,75	-0,15	1,90	0,51	-0,30		
21	19	0,5	0,3	0,2	26,4	1	25,68	-0,72	1,34	0,25	-0,97		
22	20	0,6	0,2	0,2	24,7	1	24,47	-0,23	1,69	0,40	-0,39		
23	21	0	0,5	0,5	35,8	1	34,30	-1,50	1,44	0,29	-2,12		
24	22	0,2	0,6	0,2	33	1	33,67	0,67	1,42	0,28	0,93		
25	23	0,3	0,4	0,3	30,3	1	30,13	-0,17	1,08	0,16	-0,20		
26	24	0,1	0,8	0,1	40,4	1	39,38	-1,02	2,45	0,84	-6,53		
27	25	0,3	0,3	0,4	30,5	1	30,42	-0,08	1,20	0,20	-0,10		
28	26	0,2	0,4	0,4	32,1	1	32,44	0,34	1,12	0,18	0,42		
29	27	0,4	0,3	0,3	27,8	1	27,35	-0,45	1,05	0,15	-0,54		
30	28	0,9	0	0,1	33,8	1	31,87	-1,93	2,24	0,71	-6,58		
31	29	0,5	0,5	0	32,9	1	33,03	0,13	1,70	0,40	0,22		
32	30	0,3	0,1	0,6	36	1	36,76	0,76	1,90	0,51	1,56		
33	31	0,8	0,1	0,1	25,8	1	27,91	2,11	2,02	0,57	4,93		
34								1,27					
35							Ecart-type des résidus						

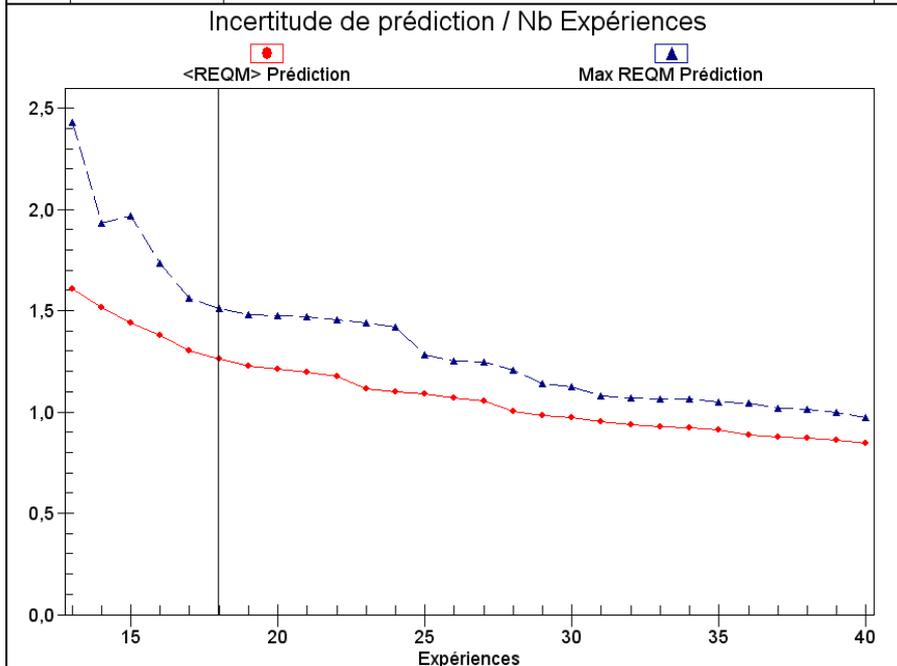
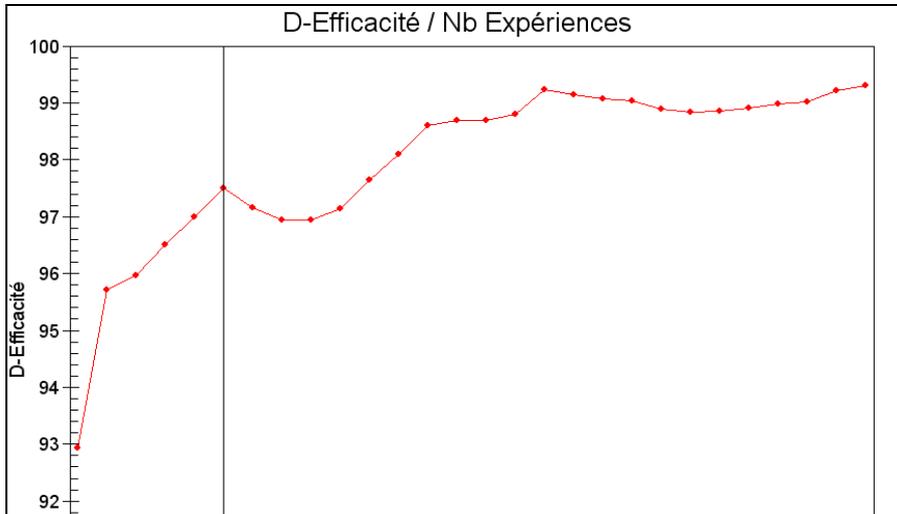
# Céramique : Leviers (intervalles de confiance)

## Modèle polynomial – RN à 3 neurones cachés





# Céramique : Plans d'expériences D-optimaux (sans les données initiales) pour RN à 3 NC



Plan d'expériences optimal à 13 points

Nb	Coarse	Medium	Fine	Porosity
13	0	1	0	44,54
13	0,3	0,65	0,05	36,37
13	0	0	1	43,06
13	0,5	0,35	0,15	26,91
13	0,7	0	0,3	29,59
13	0,85	0,15	0	30,86
13	0	0,45	0,55	34,32
13	0,4	0	0,6	36,96
13	0,2	0,6	0,2	33,67
13	0,45	0,15	0,4	28,13
13	0	0,9	0,1	40,73
13	0	0,15	0,85	39,33
13	1	0	0	35,65

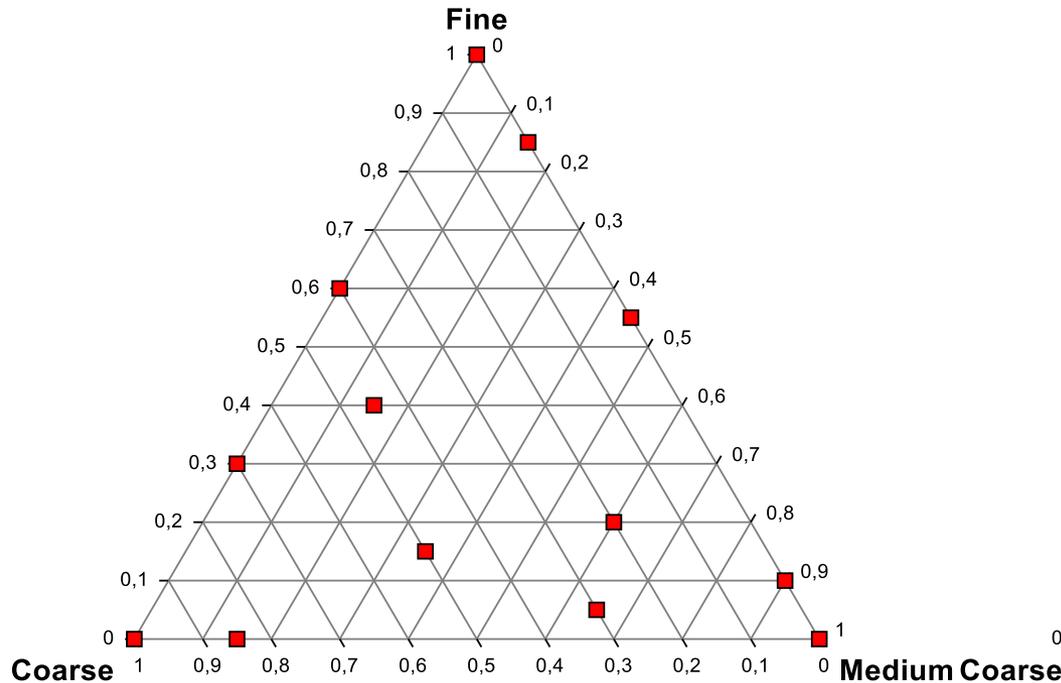
Plan d'expériences optimal à 18 points

Nb	Coarse	Medium	Fine	Porosity
18	0	1	0	44,54
18	0,25	0,7	0,05	37,91
18	0	0	1	43,06
18	0,45	0,4	0,15	28,01
18	0,75	0	0,25	29,45
18	0,75	0,25	0	30,75
18	0	0,45	0,55	34,32
18	0,35	0	0,65	38,67
18	0,2	0,55	0,25	32,82
18	0,5	0,15	0,35	26,5
18	0	0,9	0,1	40,73
18	0	0,15	0,85	39,33
18	0,95	0,05	0	33,49
18	0,75	0,1	0,15	26,54
18	0,25	0,75	0	39,51
18	0,5	0,05	0,45	31,75
18	0,3	0,15	0,55	33,85
18	0,95	0	0,05	33,74

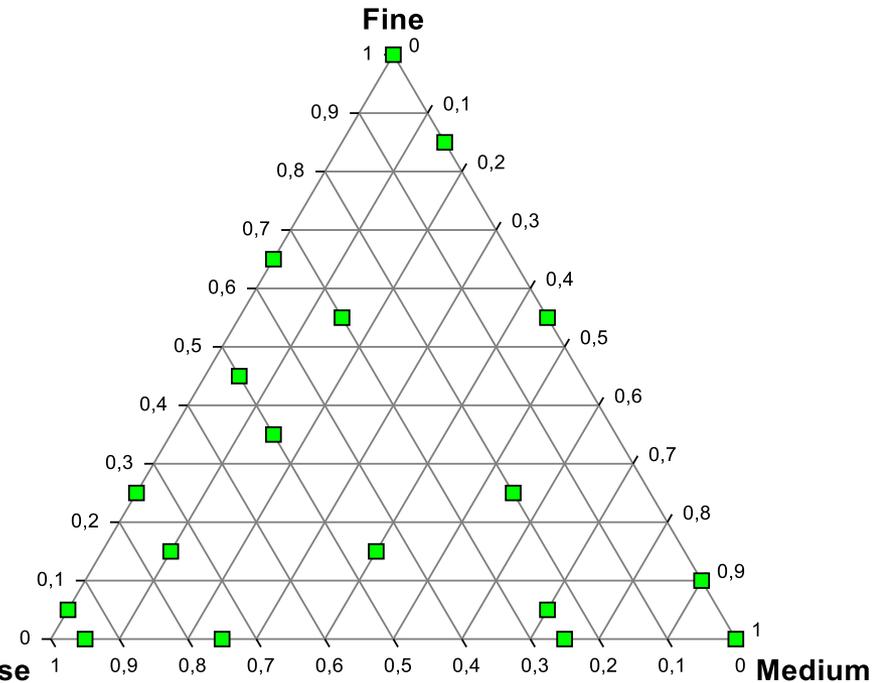


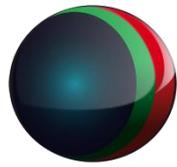
# Céramique : Points D-optimaux (sans les données initiales) pour RN à 3 NC

Céramique : 13 points optimaux

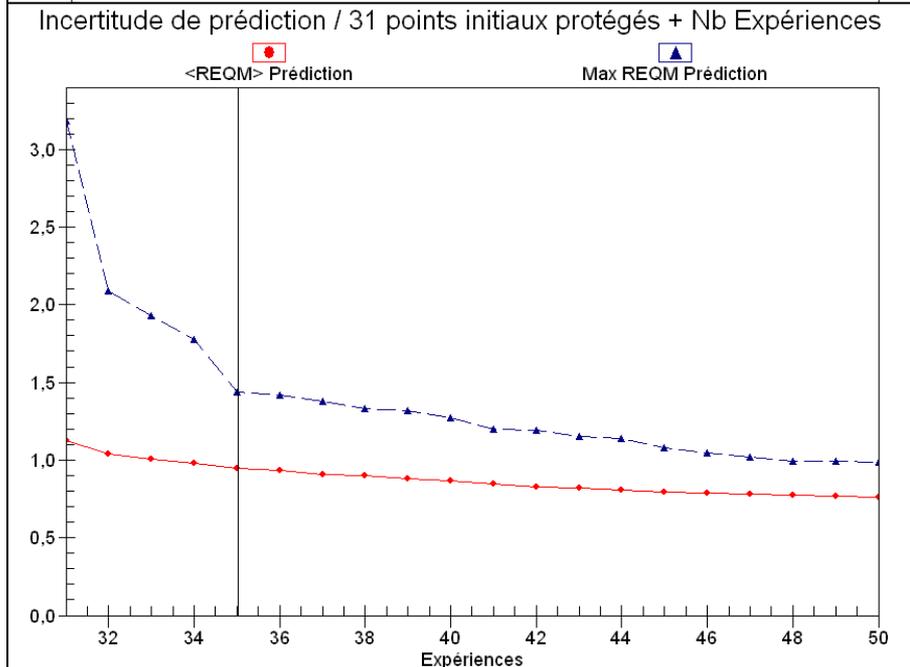
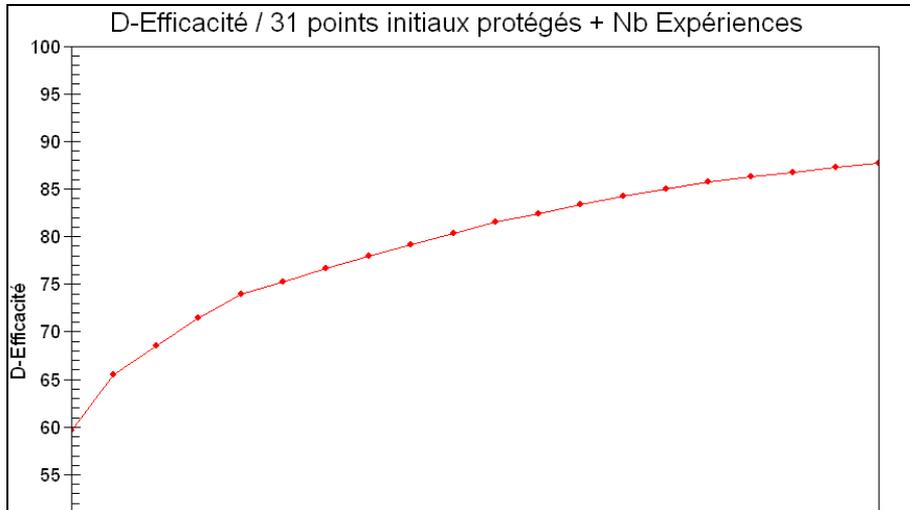


Céramique : 18 points optimaux





# Céramique : Plans d'expériences D-optimaux (avec les données initiales) pour RN à 3 NC



Plan initial à 31 points + 4 points optimaux

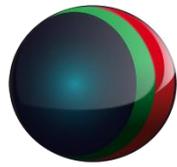
Nb	Coarse	Medium	Fine	Porosity
31	0,4	0,4	0,2	28,8
31	0,7	0,3	0	31,9
31	0,5	0	0,5	32,8
31	0,3	0,7	0	37,4
31	0,1	0	0,9	44,3
31	0,7	0	0,3	28,9
31	0,2	0,2	0,6	35,9
31	0,1	0,1	0,8	40,9
31	0,5	0,1	0,4	29,4
31	0,5	0,4	0,1	27,2
31	0,2	0,3	0,5	35,1
31	0	0,3	0,7	31,6
31	0,4	0,2	0,4	29,2
31	0,3	0	0,7	38,6
31	0,2	0,5	0,3	29,8
31	0,3	0,5	0,2	31,9
31	0,1	0,4	0,5	32,9
31	0	0,7	0,3	34,9
31	0,5	0,3	0,2	26,4
31	0,6	0,2	0,2	24,7
31	0	0,5	0,5	35,8
31	0,2	0,6	0,2	33
31	0,3	0,4	0,3	30,3
31	0,1	0,8	0,1	40,4
31	0,3	0,3	0,4	30,5
31	0,2	0,4	0,4	32,1
31	0,4	0,3	0,3	27,8
31	0,9	0	0,1	33,8
31	0,5	0,5	0	32,9
31	0,3	0,1	0,6	36
31	0,8	0,1	0,1	25,8

D-Efficacité  
**60%**

4 points optimaux

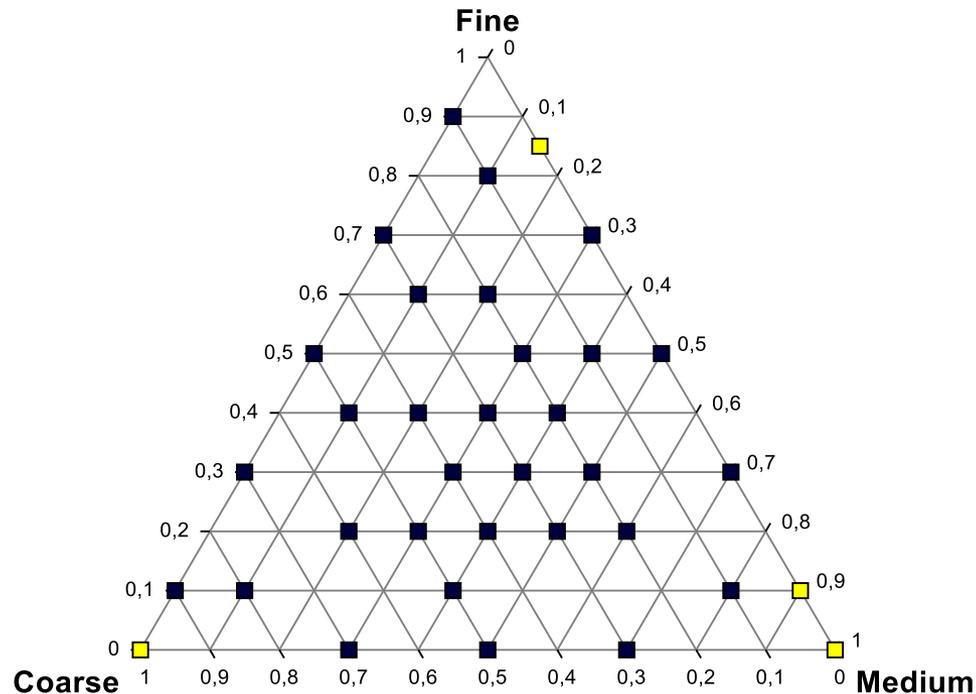
35	0	1	0	?
35	1	0	0	?
35	0	0,15	0,85	?
35	0	0,9	0,1	?

**74%**



# Céramique : Points D-optimaux (avec les données initiales) pour RN à 3 NC

Céramique : 31 points initiaux + 4 points optimaux



**D-efficacité = 75 %**



- **Il existe des réseaux de neurones adaptés aux modèles de mélange :**
  - **En chimie**
  - **Pour la gestion de portefeuille en finance**
- **Ces modèles ont une flexibilité et une précision bien supérieure aux modèles polynomiaux, au prix d'un plus grand nombre de coefficients.**
- **Ces modèles neuronaux peuvent être exploités ou combinés pour :**
  - **Du calcul direct, du calcul inverse**
  - **Des fonctions de désirabilité pour de l'optimisation**
  - **Des plans d'expériences pour la recommandation de nouveaux points**
- **Neuro One reste à ce jour le logiciel le plus convivial pour calculer des réseaux de neurones et des plans d'expériences pour modèles de mélange.**
- **Les calculs sont possibles dans R. Il n'existe pas (en 2019) de package dédié et le code doit être écrit sur mesure (et donne de très bons résultats).**



**Merci pour votre attention**

**patrice.kiener@inmodelia.com**

**Tel : +33.9.53.45.07.38**