

UDOPIA

Université Paris-Saclay's Doctoral Program in Artificial Intelligence



Projet doctoral

Title: Learning to quantify uncertainties in scientific machine learning methods with application in hemodynamics

Titre : Apprendre à quantifier les incertitudes dans les méthodes scientifiques d'apprentissage automatique avec des applications en hémodynamique

Abstract: High-stake decision processes and scientific applications require both robust methods and the ability to quantify uncertainty of predictive machine learning approaches to minimize the risks and provide the required scientific rigor. Nevertheless, traditional machine learning methods such as deep learning have difficulties in explaining their outputs, in enforcing physical constraints, and in handling small noisy data sets. Fluid mechanics, for instance, can normally offer limited or low-quality data, ground truth is regularly unknown, benchmark data sets are conventionally rare, and finally, their problems usually have unknown terms and parameters. Recently, the development of physics-informed neural networks has opened new perspectives for the development of universal different equations and solvers for high-dimensional partial-differential equations. Despite the progress of incorporating uncertainty quantification techniques into these approaches, they are still underused for various reasons. First, they are still a developing field with many unclear concepts not yet understood by the machine learning community. Likewise, fluid mechanics applications have a higher computational cost than their traditional deep learning counterparts, reinforcing the reluctance of the machine learning community in addressing some open problems faced in fluid mechanics. Likewise, machine learning communities have relied on simple data sets to validate uncertainty quantification methods, and they can only handle low-dimensional problems. In this context, this thesis aims to develop new uncertainty quantification strategies for scientific machine learning, combining physics-oriented machine learning methods and traditional techniques developed in the fluid mechanics. A focus will be made on applications of multi-scale fluid mechanics systems allowing one to test the sensitivity of different uncertainty natures and at different scales.

Résumé : Les processus de décision à fort enjeu et les applications scientifiques nécessitent à la fois des méthodes robustes et la capacité de quantifier l'incertitude des approches d'apprentissage automatique prédictif pour minimiser les risques et fournir la rigueur scientifique requise. Néanmoins, les méthodes traditionnelles d'apprentissage automatique telles que l'apprentissage profond rencontrent des difficultés à expliquer leurs résultats, à faire respecter les contraintes physiques et à traiter de petites bases de données souvent bruitées. La mécanique des fluides, par exemple, peut normalement offrir des quantités de données très limitées ou de faible qualité, la vérité terrain est régulièrement inconnue, les bases de données de référence sont conventionnellement rares, et enfin, leurs problèmes ont généralement des termes et des paramètres inconnus. Récemment, le développement des réseaux des neurones guidés par la physique a ouvert de nouvelles perspectives pour la solution de différentes équations différentielles universelles et de solveurs pour les équations aux dérivées partielles dans les problèmes de haute dimension. Malgré les progrès de l'intégration des techniques de quantification de l'incertitude dans ces techniques, celles-ci sont encore sous-utilisées pour diverses raisons. Tout d'abord, il s'agit encore d'un domaine en développement avec de nombreux concepts encore flous pour la communauté de l'apprentissage automatique. De même, les applications de la mécanique des fluides ont un coût de calcul plus élevé que leurs homologues traditionnels de l'apprentissage profond, ce qui renforce l'hésitation de la communauté de l'apprentissage automatique par les techniques traditionnelles de quantification de l'incertitude. De même, les communautés d'apprentissage automatique se sont appuyées sur des ensembles de données simples pour valider les méthodes de quantification de l'incertitude, et elles ne peuvent traiter que des problèmes à faible dimension. Dans ce contexte, cette thèse vise à développer de nouvelles stratégies de quantification d'incertitude pour l'apprentissage automatique scientifique, en combinant des méthodes d'apprentissage automatique orientées vers la physique et des techniques traditionnelles développées dans le domaine de la mécanique des fluides. Un focus sera mis sur les applications de systèmes de mécanique des fluides multi-échelles permettant de tester la sensibilité de différentes natures d'incertitudes et à différentes échelles.

Keywords: Deep learning, uncertainty quantification, complex physical systems, Bayesian methods, fluid mechanics, hemodynamics

Mots-clefs : Apprentissage profond, quantification des incertitudes, systèmes physiques complexes, approche Bayésienne, mécanique des fluides, hémodynamique

Thèmes UDOPIA :

- **First circle: Basic AI and Data Science:** Machine Learning; Uncertainty Quantification
- **Second circle: AI subdomains:** Trusted AI ;
- **Third circle: Application domains:** IA for Fundamental Science; Fluid Mechanics

Type de financement demandé : 100%

Unités de recherche : Laboratoire Interdisciplinaire pour les Sciences du Numérique (LISN), UMR 9015, Saclay.

Directeur de thèse : Didier Lucor, DR CNRS

Co-Encadrants : Alessandro Leite (INRIA), Lionel Mathelin (CNRS)

École Doctorale : n° 580 : Sciences et Technologies de l'Information et de la Communication (STIC)

Description détaillée du projet doctoral

1. Contexte scientifique, social et sociétal du projet

Les méthodes d'apprentissage automatique telles que l'apprentissage profond via les réseaux de neurones peuvent traiter de grandes quantités de données pour faire des prédictions précises. En conséquence, ils sont de plus en plus utilisés pour soutenir des prises de décision à fort enjeu dans un certain nombre de domaines. Par conséquent, il y a une demande croissante pour comprendre le processus qui a conduit à leurs sorties ainsi que les incertitudes associées aux prédictions tant par les décideurs que par les personnes concernées. Les approches de réseaux de neurones ont également été utilisées pour prédire la dynamique de systèmes physiques [1]–[4], ce que l'on appelle aujourd'hui l'apprentissage automatique scientifique (SciML) [3]. Néanmoins, de nombreux domaines scientifiques, tels que la mécanique des fluides, ne présentent pas la plupart des conditions requises par les méthodes existantes, car ils ne peuvent normalement offrir que des données limitées ou de faible qualité, la vérité terrain est régulièrement inconnue, les ensembles de données de référence sont conventionnellement rares et enfin, de nombreux problèmes peuvent avoir des termes et des paramètres inconnus [5]. Par exemple, dans le contexte des analyses de complications cardiovasculaires (CV) induites par une infection au coronavirus (COVID-19) (par ex., myocardite, cardiomyopathie, dysfonctionnement systolique/diastolique, arythmies cardiaques, mort cardiaque subite) les sources de données étiquetées par des experts sont insuffisantes et souvent bruitées. Dans ce contexte, les modèles d'apprentissage ont tendance à produire des prédictions trop assurées et n'y associent pas une quantification des incertitudes. De plus, les modèles d'apprentissage peuvent être sur-paramétrés. Dans ce contexte, la quantification de l'incertitude des prédictions est fondamentale pour continuer à les utiliser de manière fiable dans des domaines critiques, tout en les gardant interprétables par les humains. En effet, la connaissance du degré de confiance du diagnostic médical automatisé est essentielle pour gagner la confiance des cliniciens [6], [7].

L'incertitude prédictive peut être quantifiée en dissociant les incertitudes associées au modèle, connues sous le nom d'incertitude épistémique, de celles liées aux données, nommées incertitude aléatoire [8]. Alors que l'on peut réduire l'incertitude épistémique en améliorant le modèle appris, on ne peut pas facilement le faire avec cette dernière car elle est indépendante de la quantité de données d'apprentissage disponibles [9]. De nos jours, les approches les plus courantes pour quantifier ces incertitudes comprennent les réseaux de neurones bayésiens (BNN) [10], [11], les méthodes d'ensemble [12], [13], l'augmentation de données [14], [15] et les approches evidential [16]–[18].

Les réseaux de neurones bayésiens combinent l'expressivité et les performances des réseaux de neurones avec l'apprentissage bayésien, qui est souvent meilleur que les méthodes d'apprentissage via les principes du maximum de vraisemblance. En pratique, les réseaux de neurones bayésiens apprennent en modélisant la distribution a posteriori sur l'espace des paramètres du réseau et en marginalisant la probabilité de la distribution a posteriori. Par conséquent, pour de nombreux domaines, des techniques d'approximation sont nécessaires en raison de la difficulté à calculer la distribution a posteriori. L'approximation de Monte Carlo est la plus courante. En conséquence, les réseaux de neurones bayésiens sont difficiles à bien dimensionner et ils sont confrontés à la difficulté de définir des priors significatifs.

D'autre part, les méthodes d'ensemble font des prédictions en combinant celles obtenues par chaque membre de l'ensemble. Cette synergie conduit à une meilleure généralisation. De plus, la variabilité des réponses des membres offre un moyen intuitif d'évaluer l'incertitude du modèle. En pratique, au lieu d'approximer la distribution a posteriori comme le font les méthodes bayésiennes, les méthodes d'ensemble tentent d'en obtenir de multiples modes en entraînant différents réseaux de neurones indépendamment avec différents paramètres d'initialisation. Ainsi, les réseaux de neurones convergent vers différents optima locaux. Par conséquent, ils sont faciles à mettre en œuvre et à bien évoluer puisque les membres de l'ensemble peuvent être tournés en parallèle. Néanmoins, assurer la diversité des membres reste un défi important. En outre, comme la demande de ressources informatiques augmente avec le nombre de membres, les méthodes d'ensemble sont généralement limitées à de petits réseaux de neurones.

2. Objectif scientifique

Malgré les progrès de l'intégration des techniques de quantification de l'incertitude dans les méthodes d'apprentissage profond, elles sont encore sous-utilisées pour différentes raisons. Premièrement, il s'agit encore d'un domaine en développement avec de nombreux concepts et une compréhension peu claire par la communauté de l'apprentissage automatique. De même, les techniques SciML présentent un coût de calcul plus élevé que leurs homologues traditionnels d'apprentissage profond, ce qui renforce l'hésitation de la communauté de l'apprentissage automatique à l'égard de la quantification de l'incertitude.

Bien que les méthodes d'ensemble offrent un bon compromis entre performance prédictive et coût de calcul par rapport aux réseaux de neurones bayésiens, de nombreuses études sur ces méthodes se sont concentrées sur la performance de la précision prédictive, négligeant l'incertitude prédictive pour un ensemble de problèmes et de jeux de données. En outre, l'excès de confiance dans un seul membre de l'ensemble influence les autres, et des travaux récents ont montré que les méthodes ensemblistes peuvent être incapables de le gérer correctement [13], [19]. En outre, il peut être difficile de quantifier leur incertitude en utilisant uniquement les métriques existantes [20]. De plus, il est nécessaire d'examiner des stratégies qui encouragent un seul membre à se démarquer du groupe au lieu de fournir tous la même prédiction, éventuellement erronée.

Dans ce contexte, cette thèse a pour objectif de développer de nouvelles stratégies de quantification d'incertitudes dédiées à la fiabilisation de méthodes pour l'apprentissage automatique scientifique dans le domaine de la mécanique des fluides numériques. Un focus sera fait sur des applications de systèmes de mécanique des fluides multi-échelles permettant de tester la sensibilité de la quantification à des incertitudes de différentes natures et à différentes échelles. Elle envisage également l'utilisation de méthodes d'analyse après-coup séparées du modèle prédictif. Dans ce cas, un modèle externe observe les méthodes d'apprentissage et tente de comprendre leurs incertitudes prédictives en observant les différents patterns d'erreurs qui conduisent aux incertitudes prédictives des modèles. Enfin, cette thèse explorera l'utilisation de méthodes de d'incertitude classiques (par ex., polynômes de chaos, indices de Sobol) avec ceux utilisés par les méthodes d'apprentissage profond.

3. Impact attendu

Les résultats de la thèse permettront d'accélérer et d'améliorer la précision des outils de quantification des incertitudes des modèles d'apprentissage profond et donc d'élargir leur champ d'application, notamment en termes de taille de réseau ou d'architecture (par ex., graphes, récurrents, à mémoire) et ainsi son couplage avec les modèles physiques. De plus, en intégrant les approches de quantification d'incertitudes, jusqu'à présent ignorées par la communauté d'apprentissage automatique ouvrira à un nouveau champ d'applications et permettra de les améliorer en termes de coût de calcul et passage à l'échelle. Enfin, l'utilisation des méthodes d'analyse d'après-coup permettra d'offrir des explications sur les processus empruntés par les modèles d'apprentissage, pour qualifier, par exemple, l'incertitude du modèle due au manque de données de celles inhérentes au changement de la loi de distribution [21].

4. Justification de l'intérêt du projet pour le programme UDOPIA

La quantification de l'incertitude des prédictions d'un modèle déterminé par apprentissage automatique revêt un enjeu important et constitue un champ de recherche actif [22]. Plusieurs approches sont typiquement suivies, selon la quantité de paramètres à prendre en compte comme la précision recherchée, le type d'incertitude considérée, entre autres, mais des efforts de recherche sont nécessaires pour élargir le champ d'application de ces méthodes en termes de taille de modèle et/ou de données d'entraînement considéré (passage à l'échelle) et en termes de précision. C'est ce qui est proposé ici avec une équipe pluridisciplinaire comportant des spécialistes de quantification des incertitudes et des experts d'apprentissage automatique.

5. Compétences spécifiques des encadrants et équipes

Cette thèse englobe des aspects multidisciplinaires en méthodes d'apprentissage automatique comme les réseaux de neurones, les réseaux adverses génératifs, les méthodes bayésiennes, et les approches de quantification d'incertitudes, ainsi que des expertises en mécanique de fluides. Ce sont les champs de compétences des encadrants et de l'équipe auquel le candidat ou la candidate sera intégré.e.

La thèse sera dirigée par D. Lucor (CNRS-LISN) et co-encadrée par L. Mathelin (CNRS-LISN) et A. Leite (INRIA-LISN). L'équipe encadrante présente donc un bon équilibre entre des chercheurs du département de mécanique sensibles aux techniques d'apprentissage automatique et du département des sciences de données et algorithmes/apprentissage/calculs du LISN.

1. **Didier Lucor** - Directeur de recherche CNRS et responsable du département de génie mécanique du LISN. Ses intérêts de recherche et son expertise technique sont la modélisation stochastique et la mécanique computationnelle, avec un accent sur la quantification de l'incertitude, l'assimilation de données, l'analyse de sensibilité, l'apprentissage statistique informé par la physique et l'optimisation robuste.
2. **Lionel Mathelin** - Chercheur au LISN-CNRS. Ses intérêts de recherche et expertise technique incluent l'identification et le contrôle de systèmes physiques de haute dimension, les approches de réduction de la dimensionnalité telles que l'apprentissage sur variétés et graphes, et la quantification et la propagation de l'incertitude dans les modèles numériques tels que les méthodes bayésiennes.
3. **Alessandro Leite** - Advanced Research Position INRIA, chercheur dans l'équipe A&O du LISN. Ses intérêts de recherche et expertises techniques comprennent l'apprentissage automatique, les méthodes d'apprentissage automatique explicables et les réseaux neuronaux.

6. Programme de recherche envisagé

6.1. Méthode de quantification d'incertitude ensembliste basée sur des expansions de polynômes de chaos

Les approches ensemblistes et l'expansion de polynômes de chaos sont souvent utilisées comme modèles de substitution de quantification d'incertitude. Néanmoins, ils sont souvent employés dans les espaces à faible dimension due à leur coût de calcul et à leurs besoins de données annotées pour atteindre la précision demandée par les applications dans les domaines scientifiques, médical et aéronautique, par exemple. En outre, ces méthodes sont sensibles aux poids d'initialisation des réseaux. Récemment, les réseaux de neurones basés sur la physique, en anglais Physics-Informed Neural Networks (PINN), ont été spécifiquement conçus pour intégrer le calcul des équations différentielles ordinaires, les équations différentielles partielles, les équations non linéaires et intégro-différentielles, dans la composition du réseau de neurones. Ils ont été utilisés avec succès non seulement pour résoudre des équations différentielles mais aussi pour exceller dans des tâches d'assimilation de données [23] et de quantification d'incertitude [24]. En revanche, ils sont encore inexplorés dans les cas des modèles ensemblistes intégrée aux polynômes de chaos et cela sera exploré comme première contribution de cette thèse.

Publications envisagées :

1. Une publication dans une conférence comme International Conference on Machine Learning (ICML), AAAI Conference on Artificial Intelligence ou NeurIPS.
2. Une publication dans une revue internationale comme Journal of Computational Physics, Machine Learning Research (JMLR) ou Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.

6.2. L'analyse après-coup pour quantifier les incertitudes associées aux modèles d'apprentissage profond

Différentes méthodes d'analyse après-coup ont été développées pour expliquer les modèles du type boîte noire tels que les réseaux de neurones [25], [26] [27]. Récemment, elles ont également commencé à être intégrées directement dans l'architecture des réseaux [28], [29]. Néanmoins, leur utilisation est limitée aux problèmes de classification et pas encore aux modèles basés sur la physique [5], [30]. Une des lignes de recherche sera de quantifier les incertitudes d'un réseau de neurones en observant les patterns d'activations de neurones. L'autre sera de combiner des méthodes comme l'analyse contrefactuelle ou des méthodes de prototypes pour quantifier les différentes natures d'incertitudes. Ces deux approches ont l'avantage de permettre aussi de générer de données en explorant les frontières de décision et en posant des questions du type « what if » inaccessibles aux modèles souvent utilisés pour quantifier les incertitudes de réseaux de neurones. Enfin, elles permettent aussi d'expliquer le processus de décision des réseaux.

Publications envisagées :

1. Une publication dans une conférence comme International Conference on Machine Learning (ICML), International Conference on Learning Representations (ICLR), AAAI Conference on Artificial Intelligence ou NeurIPS.
2. Une publication dans une revue internationale comme Journal of Computational Physics, Machine Learning Research (JMLR) ou Future Generation Computer Systems.

6.3. Quantification d'incertitudes dans les systèmes physiques complexes avec application en hémodynamique

Les réseaux de neurones guidés par la physique ont la capacité d'intégrer des contraintes physiques mêmes dans les domaines avec un espace d'exploration à haute dimension et avec un coût de calcul informatique faible en comparaison aux approches traditionnelles, ainsi avec

une bonne capacité de généralisations. Un défi consiste à les faire distinguer leurs différents types d'incertitudes du cas de changement de distribution des données. En outre, aujourd'hui il en manque aussi de bases de données de références de quantification d'incertitudes dans les systèmes complexes, ce qui sera exploré comme troisième contribution de cette thèse.

Le potentiel et les performances des développements proposés seront ensuite évalués sur une application en mécanique des fluides d'hémodynamique, cf. Section 7 ci-dessous.

Publications envisagées :

1. Une publication dans une conférence comme International Conference on Machine Learning (ICML) ou NeurIPS.
2. Une publication dans une revue internationale comme Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering ou Journal of Computational Physics.

Tableau 1. Calendrier prévisionnel

<i>Activités</i>	<i>Année</i>
Une méthode de quantification d'incertitude ensembliste basée sur des expansions de polynômes de chaos	<i>Première</i>
L'analyse après-coup pour quantifier les incertitudes associées aux modèles d'apprentissage profond	<i>Deuxième</i>
Quantification d'incertitudes dans les systèmes physiques complexes avec application en hémodynamique	<i>Troisième</i>

7. Résultats attendus et perspectives en recherche et applications

Des travaux récents ont proposé un cadre d'apprentissage pour intégrer des techniques de mesures in vivo non invasives et bruitées à des modèles physiques d'écoulements sanguins pulsatives personnalisés, suffisamment complets pour prédire les contraintes de cisaillement à la paroi et la propagation des ondes de pouls [31]. Pour cette thèse, l'objectif est de développer un apprentissage automatique robuste sur la surveillance hémodynamique et cardiaque sur des modèles similaires, en vue d'une classification des maladies CV induites par le COVID-19, par exemple. En premier lieu, nous proposons de générer un ensemble de données hémodynamiques dans l'arbre artériel systémique à partir de nos modèles cardiovasculaires simplifiés pour différents niveaux de résolution [32], [33], de manière à cartographier par la suite des fonctions de régression qui relient des mesures non invasives facilement obtenues (par ex., la pression périphérique) à des indices centraux (mesures difficilement obtenues comme la pression centrale) à l'aide de techniques d'apprentissage automatique. La validation de nos techniques de quantification d'incertitudes des prédictions des réseaux de neurones profonds sur cette base de données, devrait nous permettre de fournir des critères permettant de séparer l'incertitude de prédiction liée aux données médicales, de celle du modèle.

8. Conditions de réalisation de la thèse

Le candidat ou la candidate sera affilié.e à l'équipe DATA science, TrAnstition, Fluid instabiLity, contrOI, Turbulence (DATAFLOT) du LISN du campus Paris-Saclay. Il ou elle aura donc accès à toutes les

ressources internes comme les jeux de données, clusters de calcul CPU et GPU, mais également à des ressources externes type les clusters de calcul Saclay-IA.

9. Références bibliographiques

- [1] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, “Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 378, pp. 686–707, Feb. 2019.
- [2] L. Yang, X. Meng, and G. E. Karniadakis, “B-PINNs: Bayesian Physics-Informed Neural Networks for Forward and Inverse PDE Problems with Noisy Data,” *J. Comput. Phys.*, vol. 425, p. 109913, Jan. 2021.
- [3] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, “Physics-informed machine learning,” *Nat. Rev. Phys.*, vol. 3, no. 6, Art. no. 6, Jun. 2021.
- [4] E. Haghighat, M. Raissi, A. Moure, H. Gomez, and R. Juanes, “A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 379, p. 113741, Jun. 2021.
- [5] A. F. Psaros, X. Meng, Z. Zou, L. Guo, and G. E. Karniadakis, “Uncertainty Quantification in Scientific Machine Learning: Methods, Metrics, and Comparisons,” *arXiv:2201.07766*, Jan. 2022.
- [6] B. Ghoshal and A. Tucker, “Estimating Uncertainty and Interpretability in Deep Learning for Coronavirus (COVID-19) Detection,” *arXiv:2003.10769*, Mar. 2020.
- [7] Y. Kwon, J.-H. Won, B. J. Kim, and M. C. Paik, “Uncertainty quantification using Bayesian neural networks in classification: Application to biomedical image segmentation,” *Comput. Stat. Data Anal.*, vol. 142, p. 106816, Feb. 2020.
- [8] E. Hüllermeier and W. Waegeman, “Aleatoric and Epistemic Uncertainty in Machine Learning: An Introduction to Concepts and Methods,” *arXiv:1910.09457*, Sep. 2020.
- [9] J. Caldeira and B. Nord, “Deeply uncertain: comparing methods of uncertainty quantification in deep learning algorithms,” *Mach. Learn. Sci. Technol.*, vol. 2, no. 1, p. 015002, Dec. 2020.
- [10] J. Lampinen and A. Vehtari, “Bayesian approach for neural networks—review and case studies,” *Neural Netw.*, vol. 14, no. 3, pp. 257–274, Apr. 2001.
- [11] Y. Gal, “Uncertainty in Deep Learning,” Phd Thesis, University of Cambridge, England, 2016.
- [12] B. Lakshminarayanan, A. Pritzel, and C. Blundell, “Simple and Scalable Predictive Uncertainty Estimation using Deep Ensembles,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, Nov. 2017, vol. 30.
- [13] R. Rahaman and A. H. Thiery, “Uncertainty Quantification and Deep Ensembles,” *arXiv:2007.08792*, Nov. 2021, Accessed: Nov. 03, 2021.
- [14] D. Shanmugam, D. Blalock, G. Balakrishnan, and J. Gutttag, “Better Aggregation in Test-Time Augmentation,” *arXiv:2011.11156*, Oct. 2021.
- [15] L. Oala, C. Heiß, J. Macdonald, M. März, W. Samek, and G. Kutyniok, “Interval Neural Networks: Uncertainty Scores,” *ArXiv200311566*, Mar. 2020.
- [16] A. Malinin and M. Gales, “Predictive Uncertainty Estimation via Prior Networks,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2018, vol. 31.
- [17] M. Sensoy, L. Kaplan, and M. Kandemir, “Evidential Deep Learning to Quantify Classification Uncertainty,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2018, vol. 31.
- [18] D. Ulmer, “A Survey on Evidential Deep Learning For Single-Pass Uncertainty Estimation,” *arXiv:2110.03051*, Dec. 2021.
- [19] S. Fort, H. Hu, and B. Lakshminarayanan, “Deep Ensembles: A Loss Landscape Perspective,” *arXiv:1912.02757*, Jun. 2020.
- [20] A. Ashukha, D. Molchanov, A. Lyzhov, and D. Vetrov, “Pitfalls of In-Domain Uncertainty Estimation and Ensembling in Deep Learning,” in *Eighth International Conference on Learning Representations*, 2020, p. 30.
- [21] J. Chen, Y. Li, X. Wu, Y. Liang, and S. Jha, “Robust Out-of-distribution Detection for Neural Networks,” *arXiv:2003.09711*, Dec. 2021.
- [22] M. Abdar *et al.*, “A review of uncertainty quantification in deep learning: Techniques, applications and challenges,” *Inf. Fusion*, vol. 76, pp. 243–297, Dec. 2021.
- [23] M. Raissi, A. Yazdani, and G. E. Karniadakis, “Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations,” *Science*, Feb. 2020.

- [24] Y. Yang and P. Perdikaris, "Adversarial uncertainty quantification in physics-informed neural networks," *J. Comput. Phys.*, vol. 394, pp. 136–152, Oct. 2019.
- [25] M. T. Ribeiro, S. Singh, et C. Guestrin, "Why Should I Trust You?": Explaining the Predictions of Any Classifier, in 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Aug. 2016, p. 1135-1144.
- [26] S. M. Lundberg and S.-I. Lee, "A Unified Approach to Interpreting Model Predictions," *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, vol. 30, 2017.
- [27] A. Barredo Arrieta *et al.*, "Explainable Artificial Intelligence (XAI): Concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible AI," *Inf. Fusion*, vol. 58, pp. 82–115, Jun. 2020.
- [28] C. Chen, O. Li, C. Tao, A. J. Barnett, J. Su, and C. Rudin, "This looks like that: deep learning for interpretable image recognition," in *33rd International Conference on Neural Information Processing Systems*, 2019, pp. 8930–8941.
- [29] L. Schut *et al.*, "Generating Interpretable Counterfactual Explanations By Implicit Minimisation of Epistemic and Aleatoric Uncertainties," in *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, Mar. 2021, pp. 1756–1764.
- [30] E. Delaney, D. Greene, and M. T. Keane, "Uncertainty Estimation and Out-of-Distribution Detection for Counterfactual Explanations: Pitfalls and Solutions," *arXiv:2107.09734*, Jul. 2021.
- [31] G. Kissas, Y. Yang, E. Hwuang, W. R. Witschey, J. A. Detre, and P. Perdikaris, "Machine learning in cardiovascular flows modeling: Predicting arterial blood pressure from non-invasive 4D flow MRI data using physics-informed neural networks," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 358, p. 112623, Jan. 2020.
- [32] A. Braut, L. Dumas, and D. Lucor, "Uncertainty quantification of inflow boundary condition and proximal arterial stiffness–coupled effect on pulse wave propagation in a vascular network," *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.*, vol. 33, no. 10, p. e2859, 2017.
- [33] O. Adjoua, S. Pitre-Champagnat, and D. Lucor, "Reduced-order modeling of hemodynamics across macroscopic through mesoscopic circulation scales," *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.*, vol. 35, no. 12, p. e3274, 2019.