

# De l'optimisation à l'IA pour l'identification : un voyage à travers les “small data”

Rodolphe Le Riche

CNRS LIMOS à Mines Saint-Etienne et UCA

28 avril 2022

Modélisation et Simulation Numérique des Matériaux  
en l'honneur de Georges Cailletaud, Ecole des Mines de Paris



J'ai passé les années 96 et 97 au Centre des Matériaux à Evry, pour aider au développement de Z-opt. Il régnait au sein de l'équipe une certaine ... intensité.

# Notre vision de l'identification en 1996-97 I

Trouver les paramètres  $\theta^*$  d'une loi de comportement

$$\begin{cases} Y(t) = h(Z, t; \theta) & Y, \text{ qq chose mesurable, ctrte, déform.} \\ \frac{\partial Z(t)}{\partial t} = g(Z, t; \theta) & Z, \text{ variables internes} \end{cases}$$

par résolution d'un problème d'optimisation

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \mathcal{L}(\theta) \quad ,$$

$$\mathcal{L}(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y(t_i) - Y^{\text{obs}}(t_i))^{\top} W (Y(t_i) - Y^{\text{obs}}(t_i))$$

# Notre vision de l'identification en 1996-97 II

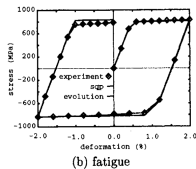
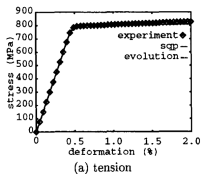
- Le physicien: quel modèle  $Z, h, g$  pour quelles expériences?
- Le numéricien-physicien: comment calculer  $Y$  ?
- Le numéricien-optimiseur: quel  $\mathcal{L}(\theta)$ , comment le minimiser ?

file optimize.inp

```
****optimize sqp
***shell z7 rvee_trac
      z7 rvee_cyc
***files material
***compare
  t_file_file
  rvee_t.test 1 3 rvee_t.exp 1 3
  t_file_file
  rvee_c.test 1 3 rvee_c.exp 1 3
***values
  xC 1.  min 0.  max 400000.
  xD 40. min 1.  max 3000.
  xQ 250. min -500. max 500.
  xb 10.6 min 0.2 max 20.0
***exponent 2.
***convergence ...
****return
```

file material.tpl

```
***behavior gen_evp
**elasticity isotropic
      young 169000.
      poisson 0.3
**potential gen_evp ev
*criterion mises
*flow norton
      n 2.
      K 622.
*kinematic nonlinear
      C ?xC
      D ?xD
*isotropic nonlinear
      R0 645.
      Q ?xQ
      b ?xb
****return
```



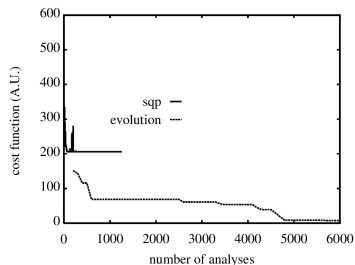
# Notre vision de l'identification en 1996-97 III

Quel  $\mathcal{L}(\theta)$ , comment le minimiser ?

- Non-identifiabilité des  $\theta$
  - Optima locaux
  - Identification sur éprouvette versus sur structure
- ⇒ utilisation d'une famille d'algorithmes d'optimization dans Z-opt (Nelder-Mead, BFGS, SQP, stratégie d'évolution, ...).

- Références :

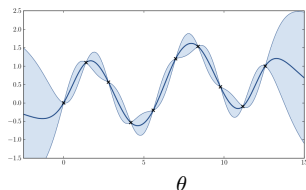
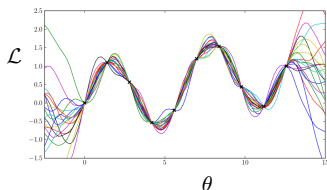
[Besson et al., 1998, Le Riche et al., 1997, Besson et al., 1997]



# IA et identification de lois de comportement en 97-98 I

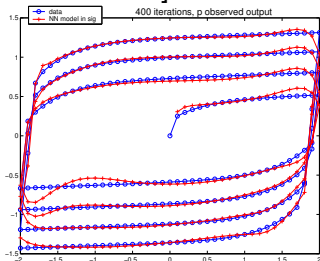
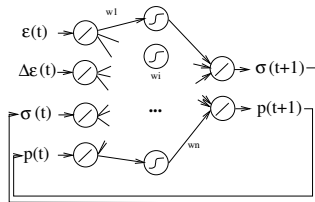
IA = apprendre “directement” des données (calculées ou mesurées).  
Dans le cadre de l'identification de lois de comportement, 2 voies:

- 1 Apprendre la distance modèle-expérience  $\mathcal{L}(\theta)$  à partir de  $[\theta^1, \mathcal{L}(\theta^1), \dots, \theta^N, \mathcal{L}(\theta^N)]$  pour résoudre  $\min_{\theta} \mathcal{L}(\theta)$  efficacement.  $N$  petit (modèle non linéaire coûteux), cadre des “small data”, par exemple optimisation Bayésienne [Le Riche and Picheny, 2021].



# IA et identification de lois de comportement en 97-98 II

- 2 Apprendre le modèle ( $h()$  et  $g()$ ) à partir d'expériences [Le Riche et al., 1999, Le Riche et al., 1998]



Le RN récurrent pouvait apprendre une ldc élasto-visco-plastique 1D avec écrouissages, mais il fallait lui donner la déformation plastique cumulée.

# Incertitudes et identification

Après mon passage au Centre des Matériaux, je me suis (entre autres) intéressé à la prise en compte des incertitudes dans l'identification de modèles.

Approche Bayésienne dans [Gogu et al., 2010],

$$\theta^* \quad \text{est remplacé par} \quad p(\theta | Y^{\text{obs}}) \propto \underbrace{p(Y^{\text{obs}} | \theta)}_{\text{vraisemblance}} \times \underbrace{p(\theta)}_{\text{prior}}$$

et il faut que le modèle soit probabiliste, par exemple

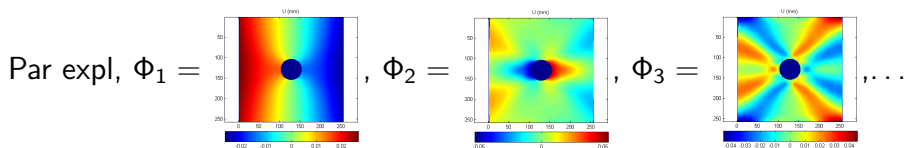
$$Y^{\text{obs}} = Y(\theta) + \varepsilon \quad , \quad \varepsilon \sim \text{loi connue}$$



# Identification, incertitudes, mesures de champs

Réduction de dimension par décomposition des champs dans une base de champs,

$$Y(\theta) = \sum_{i=1}^M \alpha_i(\theta) \Phi_i \quad , \quad M \text{ petit}$$



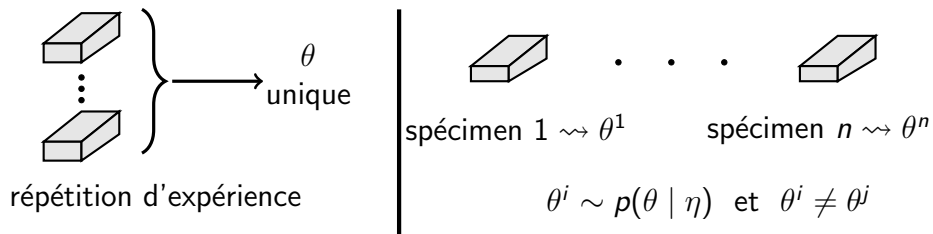
Puis,

$$p(\theta | \alpha^{\text{obs}}) \propto p(\alpha^{\text{obs}} | \theta) \times p(\theta)$$

Application à l'identification de  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $G_{12}$ ,  $\nu_{12}$  à partir d'une éprouvette trouée en traction dans [Gogu et al., 2013].

# Incertitude par spécimen I

Avec les modèles à effets mixtes, on peut prendre en compte la variabilité inter-spécimens [Laboulfie et al., 2021]

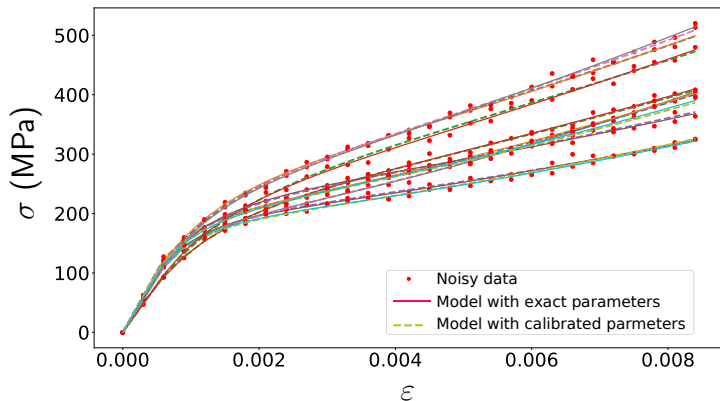


$$p(Y^{\text{obs},i}, \theta | \eta) = p(Y^{\text{obs},i} | \theta, \eta) \times p(\theta | \eta)$$

$$\mathcal{L}_i(\eta) = \int p(Y^{\text{obs},i}, \theta | \eta) d\theta \quad , \quad \mathcal{L}(\eta) = \prod_{i=1}^n \mathcal{L}_i(\eta)$$

$$\eta^* = \arg \max_{\eta} \mathcal{L}(\eta) \quad , \quad \theta^i = \arg \max_{\theta} p(Y^{\text{obs},i}, \theta | \eta^*)$$

# Incertitude par spécimen II



ONERA Damage model [Marcin et al., 2011] pour les composites à matrice céramique,  
 $\theta = (\text{module d'Young, seuil d'endommagement, vitesse d'endommagement, saturation})$

# Conclusion sur une frontière des sciences des matériaux

- Travailler au CDM avec Georges Cailletaud est bon pour les matheux appliqués.
- Certains thèmes s'imposent naturellement dans les laboratoires de matériaux : changements d'échelles, multi-physiques, ...
- D'autres demandent des éclaircisseurs tels que Georges : HPC, optimisation, machine learning.
- En particulier, les thèmes des incertitudes [Kennedy and O'Hagan, 2001], de l'analyses de sensibilité [Da Veiga et al., 2021], et le "physics-informed machine learning" [Karniadakis et al., 2021] pourraient être utiles.

# References I



Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J.-L., and Forest, S. (1997). *Mécanique non linéaire des matériaux, comportement, endommagement et méthodes numériques*, chapter 14: identification des paramètres de lois de comportement. Institut pour la Promotion des Sciences de l'Ingénieur (IPSI).



Besson, J., Le Riche, R., Foerch, R., and Cailletaud, G. (1998). Object-oriented programming applied to the finite element method part II. Application to material behaviors. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 7(5):567–588.



Da Veiga, S., Gamboa, F., looss, B., and Prieur, C. (2021). *Basics and Trends in Sensitivity Analysis: Theory and Practice in R*. SIAM.



Gogu, C., Haftka, R., Le Riche, R., Molimard, J., and Vautrin, A. (2010). Introduction to the bayesian approach applied to elastic constants identification. *AIAA journal*, 48(5):893–903.



Gogu, C., Yin, W., Haftka, R., Ifju, P., Molimard, J., Le Riche, R., and Vautrin, A. (2013). Bayesian identification of elastic constants in multi-directional laminate from moiré interferometry displacement fields. *Experimental Mechanics*, 53(4):635–648.

# References II



Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., and Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3(6):422–440.



Kennedy, M. C. and O'Hagan, A. (2001). Bayesian calibration of computer models. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 63(3):425–464.



Labouffie, C., Balesdent, M., Brévault, L., veiga, S. D., Irisarri, F.-X., Le Riche, R., and Maire, J.-F. (2021). Calibration of material model parameters using mixte-effects models. In *4th ECCOMAS Thematic Conference on Uncertainty Quantification in Computational Sciences and Engineering, UNCECOMP 2021*, pages 258–295. DOI: 10.7712/120221.8037.18933.



Le Riche, R., Cailletaud, G., and Canu, S. (1999). Vers un non-linéaire matériau automatique. talk at 4th colloque en calcul des structures, Giens, France, slides available at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03650303>.

# References III



Le Riche, R., Feyel, F., Besson, J., Cailletaud, G., Gutmann, M., and Foerch, R. (1997). L'objet matériau, de l'identification au calcul de structures. In *Actes du troisième colloque en calcul des structures*, volume 2, pages 583–588. CSMA.



Le Riche, R. and Picheny, V. (2021). Revisiting Bayesian optimization in the light of the COCO benchmark. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 64(5):3063–3087.



Le Riche, R., Souza de Curci, E., Cailletaud, G., and Canu, S. (1998). Modélisation de lois de comportement par réseaux de neurones – bilan d'une année de pluriformation INSA de Rouen / ENSMP. Technical report, INSA Rouen and ENSMP. available at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03650276>.



Marcin, L., Maire, J.-F., Carrère, N., and Martin, E. (2011). Development of a macroscopic damage model for woven ceramic matrix composites. *International Journal of Damage Mechanics*, 20(6):939–957.