

Formation Spécialisée

MASTERE DMS

Design des Matériaux et des Structures

OFFRE DE SUJET MASTERE DMS 2022/2023

Encadrement

David Ryckelynck (Mines Paris), José Alves et Nikolay Osipov (Transvalor S.A.)

Titre

Création des modèles Surrogate pour des chargements complexes en mécanique des structures par des approches Physically Informed Graph Neural Networks

Contexte et objectifs du projet DMS

La simulation numérique est aujourd'hui un pilier fondamental dans la recherche liée à la science des matériaux à tous les niveaux, en raison de sa flexibilité pour ajouter des phénomènes de plus en plus complexes et couplés. Parmi les méthodes les plus robustes pour l'étude des comportements en mécanique des solides figurent les éléments finis (FE) qui permettent une grande flexibilité pour la modélisation et une grande précision liée à la formulation sous-jacente. Cette précision est souvent liée à des temps de calcul restrictifs pour certaines situations et très longs pour des situations où la précision est moins importante que la capacité à parcourir rapidement un grand espace de réponse. Une nouvelle génération de méthodes basées sur des approches d'apprentissage profond (DL) permet aujourd'hui de gagner en vitesse de calcul par des ratios allant jusqu'à x100 ou plus tout en gardant des niveaux de précision acceptables. Comme ces méthodes doivent apprendre à partir de données observées, parfois très coûteuses à obtenir, nous envisageons maintenant des approches mixtes dans lesquelles la simulation numérique par FE est utilisée pour balayer un espace de réponse réduit avec une grande précision, puis des modèles de type DL sont entraînés sur ces réponses pour ensuite balayer un espace de réponse plus large.

Des méthodes de type réseaux de neurones convolutifs (Convolutional Neural Networks) ont déjà été testées sur ces idées [1,2] avec un grand succès et montrent l'intérêt de ces approches. Cependant, une difficulté majeure apparaît lorsque les géométries des objets d'intérêt sont complexes, par exemple lorsque l'on veut ajouter des problèmes liés au contact mécanique entre différents objets ou encore pour généraliser à des cas aux géométries très différentes de celles utilisées pour l'apprentissage.

Il est envisagé dans ce projet d'étudier une autre famille d'approches appelées Graph Convolutional Neural Networks (GNN) [3,4] qui permettent une énorme flexibilité par rapport à la structure des données utilisées pour les opérations de convolution et l'apprentissage profond. A savoir : Les approches CNN nécessitent une représentation sur des grilles régulières, alors que les approches GNN permettent d'utiliser des données structurées par un graphe, ce qui est le cas des maillages liés à la modélisation par éléments finis. Ces méthodes seront également complétées par des approches appelées Physically Informed Neural Networks (PINNs) qui permettent imposer, lors des phases d'apprentissage, le respect des équations aux dérivées partielles sous-jacentes au problème thermomécanique.

Déroulement du projet

Dans l'étude proposée, les modèles et techniques numériques nécessaires seront utilisés pour simuler les structures mécaniques avec les comportements hyper-élastiques et élasto-

plastiques. Toutes les simulations seront réalisées dans le logiciel Z-set (<http://www.zset-software.com>) développé par Mines Paris, Onera et Transvalor S.A.

Dans un premier temps, une étude bibliographique détaillée des modèles et méthodes existants pour la prise en compte des effets de taille sera réalisée. Cette période sera également mise à profit pour familiariser le candidat avec le système de simulation Z-set et son interface python zset4python.

Dans la deuxième partie (stage) du mastère, nous utiliserons une base de données des calculs effectués avec Z-set pour ensuite apprendre les modèles choisis à l'aide d'APIs dédiées au DeepLearning telles que PyTorch ou TensorFlow/Keras.

Profil demandé

Capacité d'analyse et de synthèse, de la rigueur de l'autonomie et une grande force de proposition. De bonnes connaissances en mécanique des structures et en programmation (python). Une première expérience en Machine Learning/techniques d'intelligence Artificielle serait un plus.

Références bibliographiques

- [1] N'GUYEN, Franck, BARHLI, Selim, PINO MUNOZ, Daniel, RYCKELYNCK, David. Computer vision with error estimation for reduced order modeling of macroscopic mechanical tests. *Complexity*, Wiley, 2018, 2018, 10 p. ([10.1155/2018/3791543](https://doi.org/10.1155/2018/3791543)). ([hal-01955929](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01955929))
- [2] DANIEL, Thomas, CASENAVE, Fabien, AKKARI, Nissrine, RYCKELYNCK, David. Model order reduction assisted by deep neural networks (ROM-net). *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, SpringerOpen, 2020, 7 (1), ([10.1186/s40323-020-00153-6](https://doi.org/10.1186/s40323-020-00153-6)). ([hal-02539647](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02539647))
- [3] SANCHEZ-GONZALEZ, Alvaro, GODWIN, Jonathan, PFAFF, Tobias, *et al.* Learning to simulate complex physics with graph networks. In : *International Conference on Machine Learning*. PMLR, 2020. p. 8459-8468. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2002.09405>
- [4] SATORRAS, Víctor Garcia, HOOGEBOOM, Emiel, et WELLING, Max. E(n) equivariant graph neural networks. In : *International Conference on Machine Learning*. PMLR, 2021. p. 9323-9332. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2102.09844>