

8ème édition

Data Science & Artificial Intelligence *Day*

Ensemble vers une IA responsable

Jeudi 12 Octobre 2023

09h - 17h30

**La Maison des Associations de Solidarité
Paris 13ème**



L'IA hybride

Patrice Aknin, Faicel Chamroukhi

IRT SystemX

L'IA Hybride, un champ très large

L'IA est un *game changer* dans quasiment tous les secteurs.

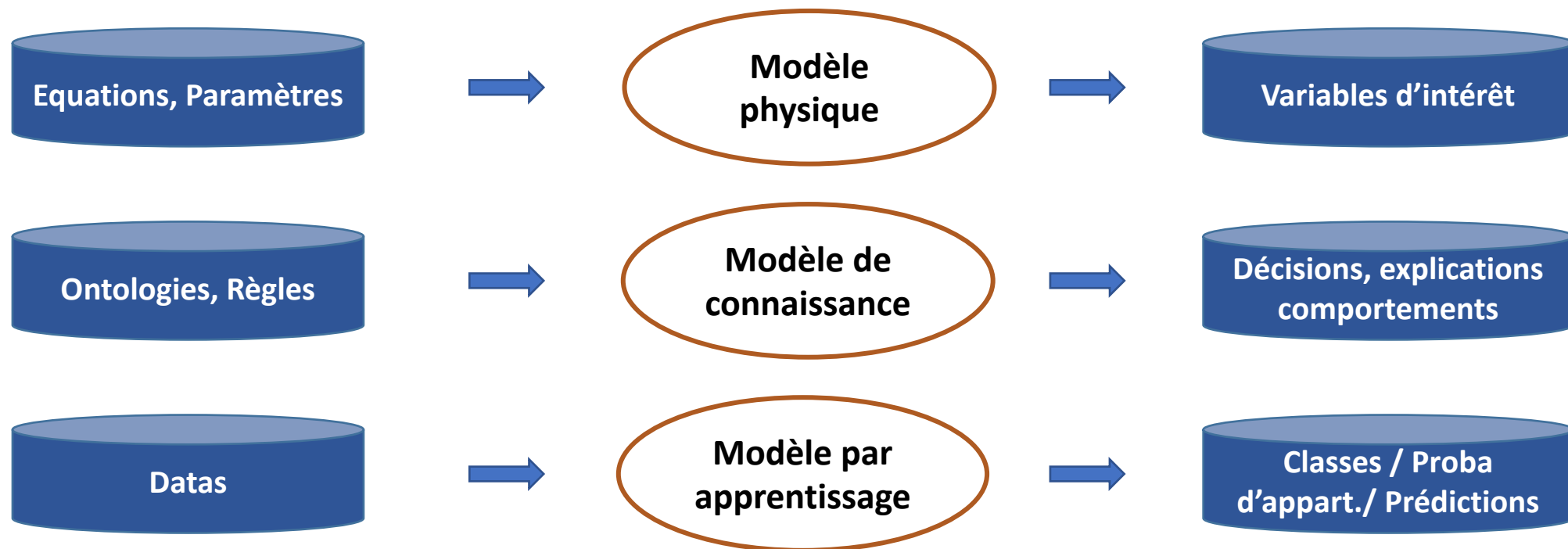
L'IA seule ne permet pas de répondre à toutes les problématiques industrielles :

- manque de sens commun
- robustesse, causalité, explicabilité font défaut
- puissance de calcul requise très (trop) importante
- nécessité de disposer de BdD qualifiées
- processus d'évaluation et standards de développement encore balbutiants

L'**IA hybride** est une solution pour dépasser certaines de ces limitations. Son approche est inclusive des savoirs humains et est donc aussi une clé dans le glissement attendu de compétences. (cf. rapport 2018 de l'Académie des Technologies)

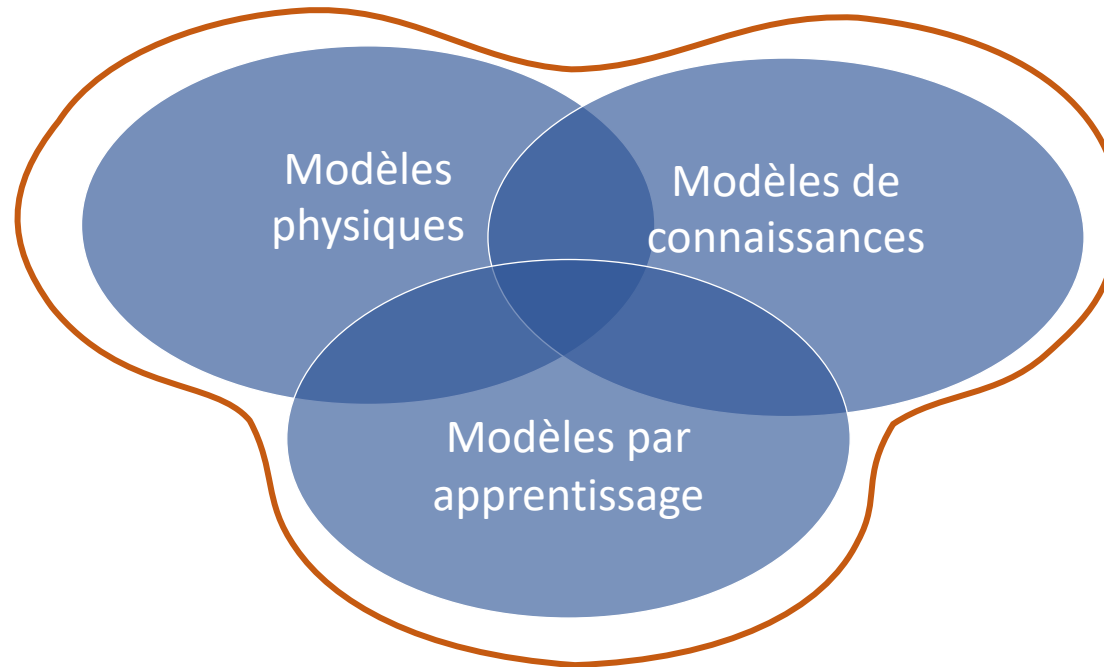
L'IA Hybride, un champ très large

Les différentes sources d'information



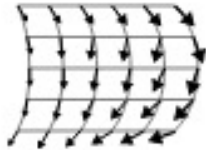
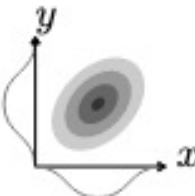
L'IA Hybride, un champ très large

Les différentes hybridations

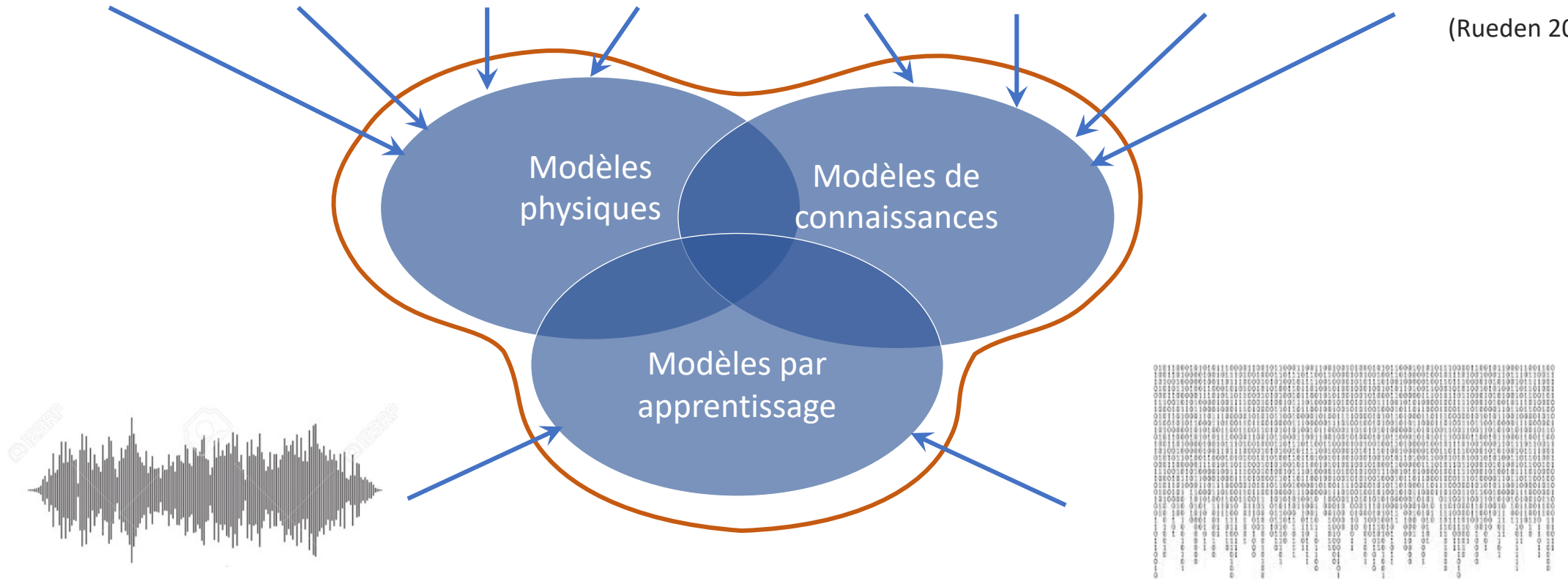


**Ingénierie
augmentée**

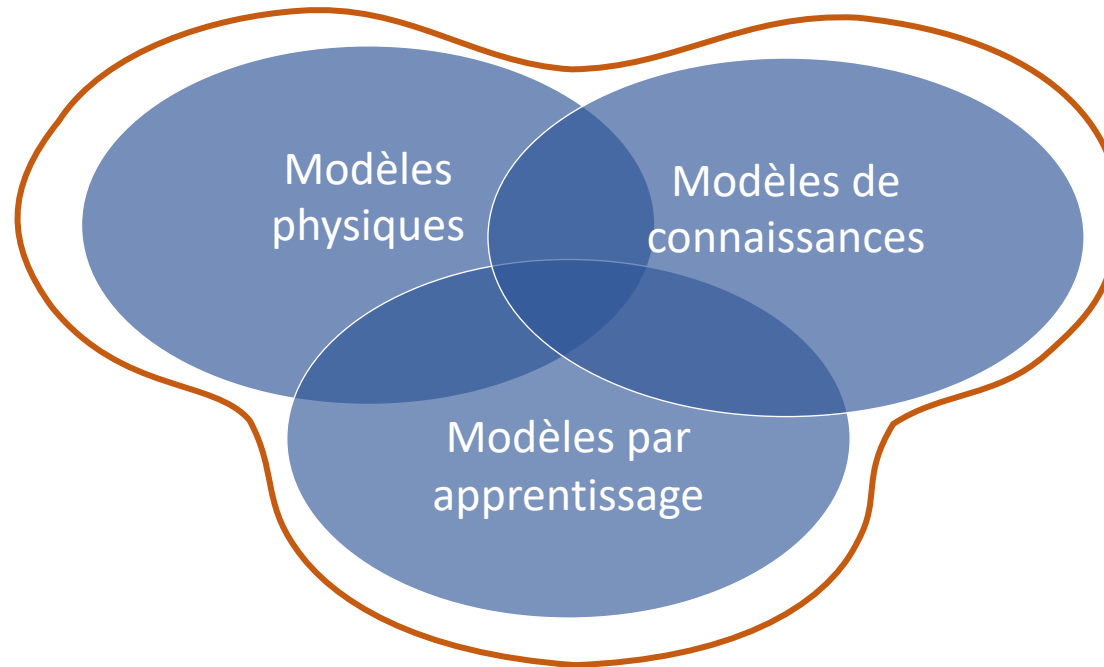
L'IA Hybride, un champ très large

Algebraic Equations	Differential Equations	Simulation Results	Spatial Invariances	Logic Rules	Knowledge Graphs	Probabilistic Relations	Human Feedback
$E = m \cdot c^2$ $v \leq c$	$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ $F(x) = m \frac{d^2 x}{dt^2}$			$A \wedge B \Rightarrow C$			

(Rueden 2023)



Physique et Machine Learning



**Ingénierie
augmentée**

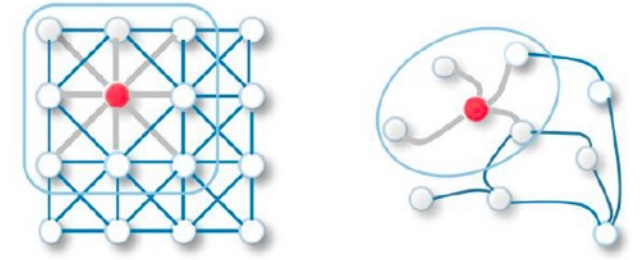
Physique et Machine Learning

- Les connaissances de la physique pour guider l'apprentissage

Integrating geometric priors in learned representations (Bronstein 2017)

Geometric deep learning, GNN et neural passing message (Arjona Martínez 2019)

MoNet architecture (Monti 2016)



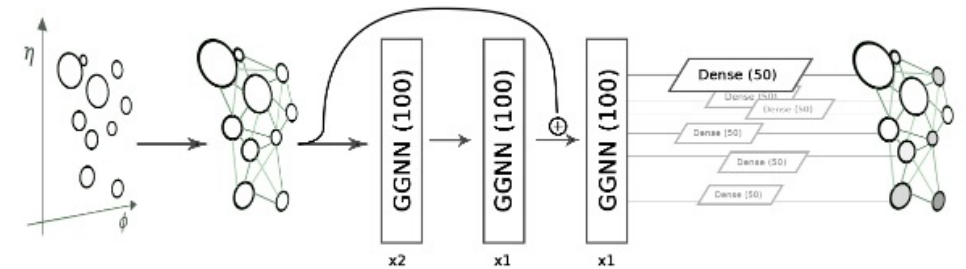
- Les équations différentielles pour améliorer le deep learning

Neural differential equations, diffusion models, ...

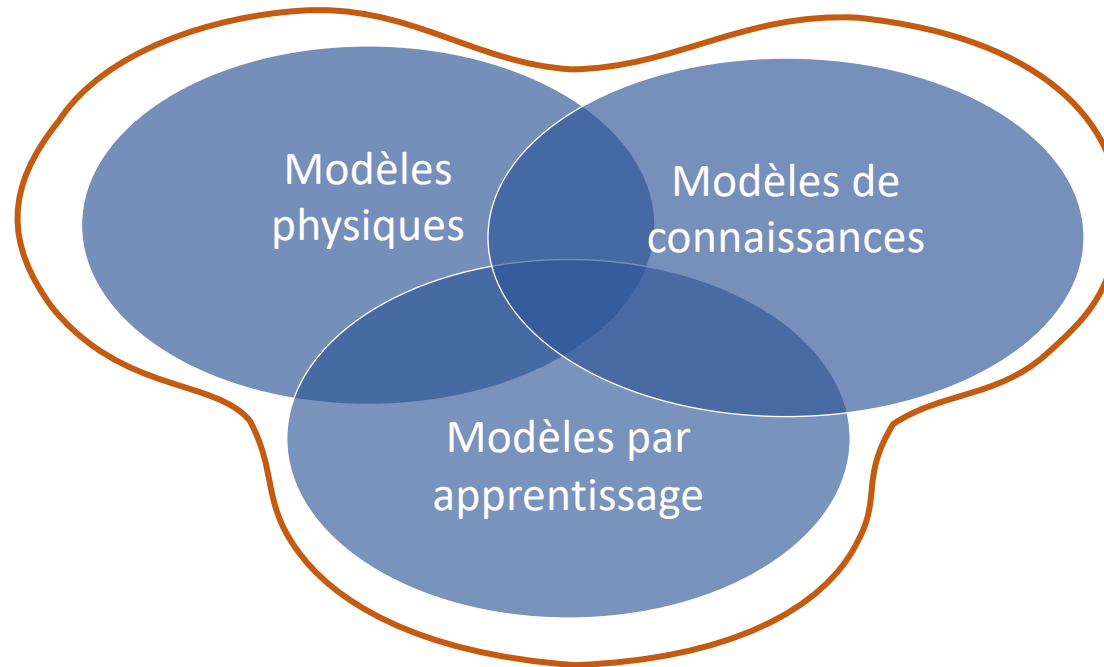
- Le deep learning pour résoudre les équations différentielles

Hypersolvers, hybrid solvers, neural operators,

PINNs - Physics-Informed Neural Networks, ... (Raissi 2019)



Connaissances et Machine Learning



**Ingénierie
augmentée**

Connaissances et Machine Learning

- AI-based generation of scientific hypotheses

Knot theory (Davies 2021)

- Post-hoc interpretability

Exemples contrefactuels, qui expliquent une prédiction en indiquant les modifications à apporter aux données pour changer la classe inférée (laugel 2019) (Pirovano 2021)

- Modèles génératifs conditionnels pour l'explication de classifieurs d'images

(Charachon 2020)

- Apprentissage de représentation pour l'alignement de concepts appris

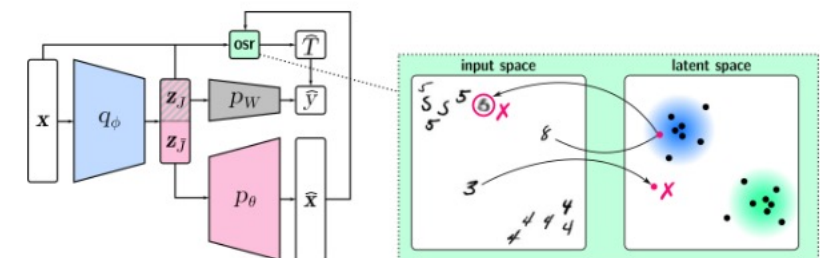
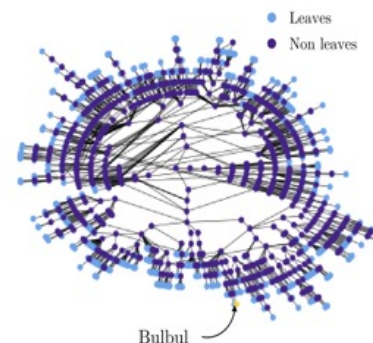
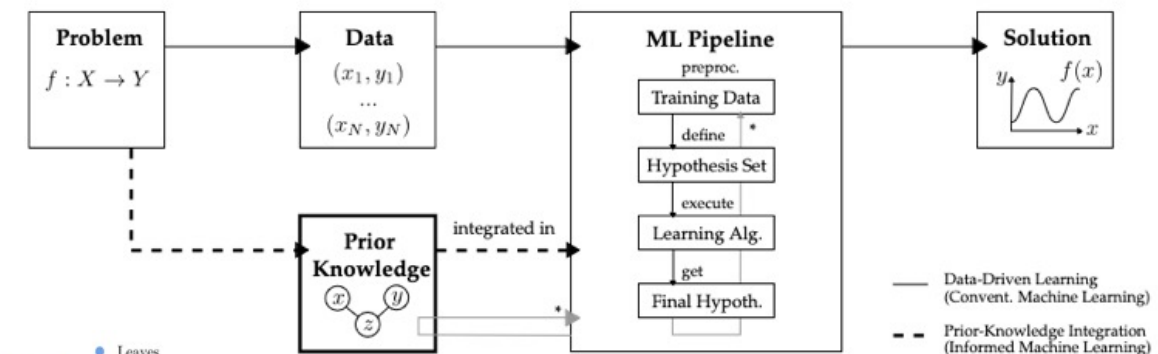
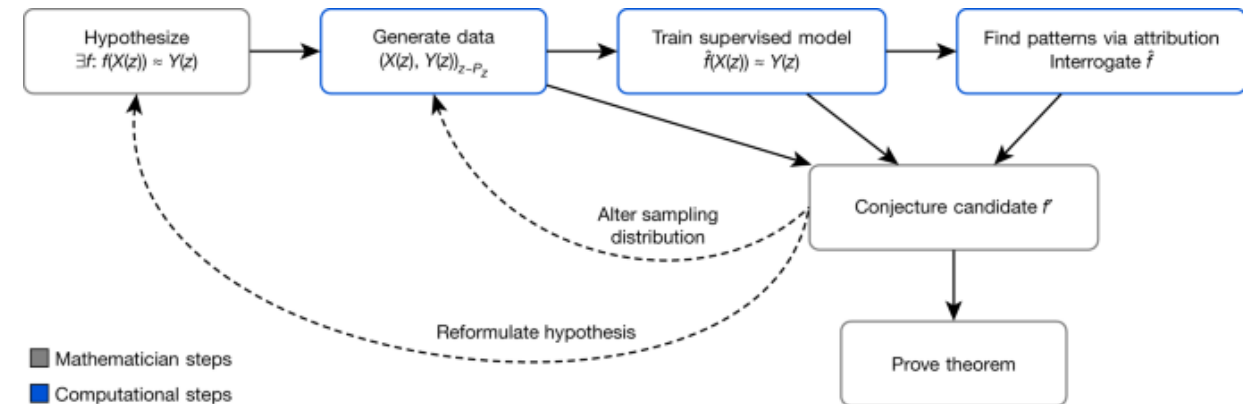
GlanceNets (Marconato 2022)

- Règles formelles pour l'explicabilité

(Audemard, 2023)

- Improving Neural-Based Classification with Logical Background Knowledge

(Ott 2023) (Battaglia 2018)



Le programme de recherche IA2 @ SystemX



Intelligence
artificielle
et ingénierie
augmentée

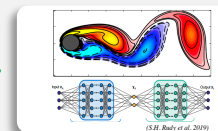
Un programme de 6
**projets collaboratifs de
R&D** à finalité industrielle
basés sur des cas d'usage

Advance project
Thesis / Postdocs / Shared work

HSA: Simulation/machine learning hybrid modeling

How industrials solvers and learned models can enrich each other ?

01



AFS: Agility and fidelity of simulations

How to improve agility and fidelity of simulation in complex systems design?

02



S2I: Industrial infrastructure supervision

How to improve decision-making on distubuted industrial systems via machine learning techniques ?

03



SAA: Augmented multi-agent simulation

How can multi-agent models benefit from real data and bring out atypical situations?

04



SMD: Business Semantics for Multi-source Data Mining

How to link heterogeneous data with established practical knowledge?

05



CAB: Cockpit and Bidirectional Assistant

How to develop a virtual assistant that learns from expert and learns the expert

06

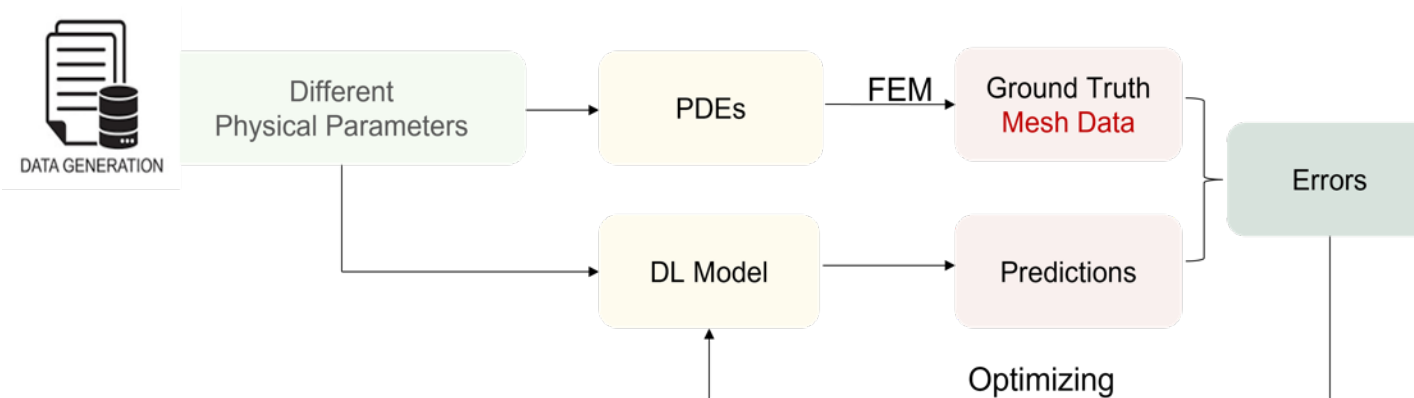


Projet HSA : Hybridation Simulation et Apprentissage

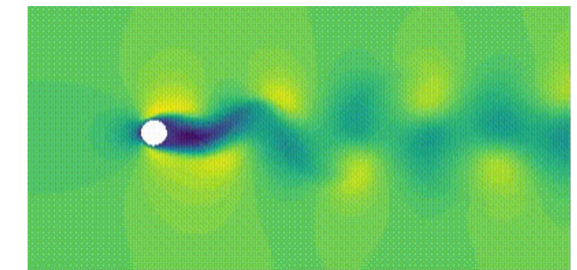
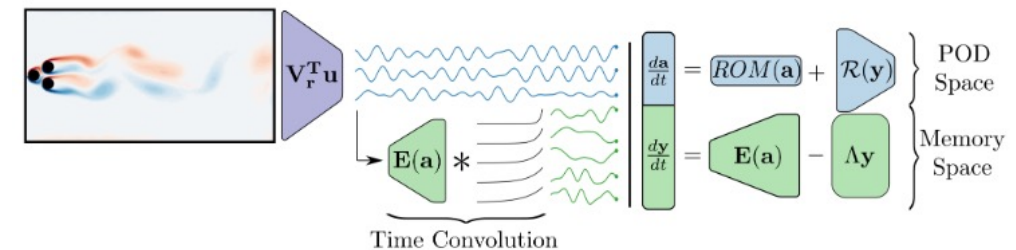
<https://www.irt-systemx.fr/projets/HSA/>

Verrous du projet

- Remplacer les solveurs physiques par des modèles basés sur des données
- IA hybride augmentant les modèles basés sur les données à l'aide de contraintes physiques



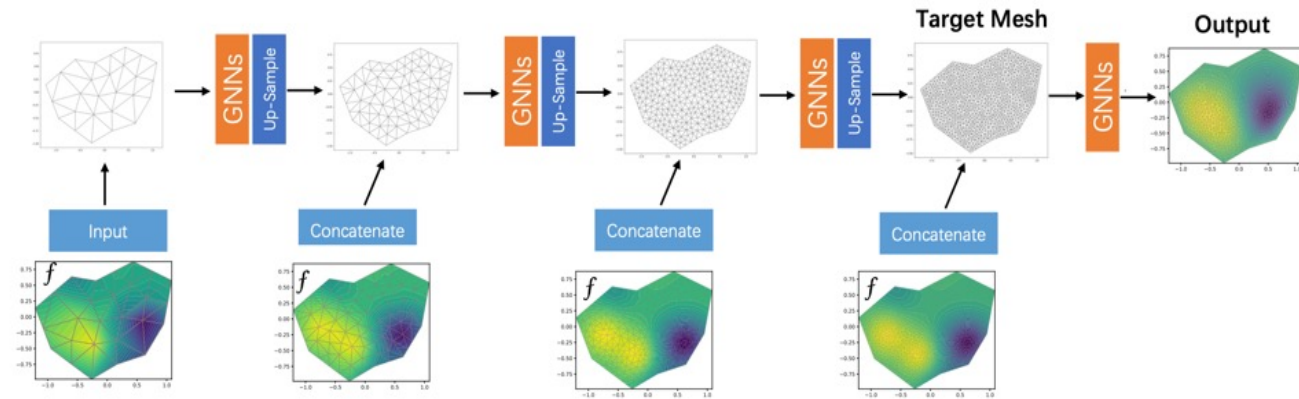
Deep Graph Neural Networks for Numerical Simulation of PDEs
Thèse de W. Liu. 2023 (LISN, Inria/SystemX)



Modèles réduits et apprentissage profond pour les EDPs
Thèse de E. Menier (en cours) (LISN, Inria/SystemX)

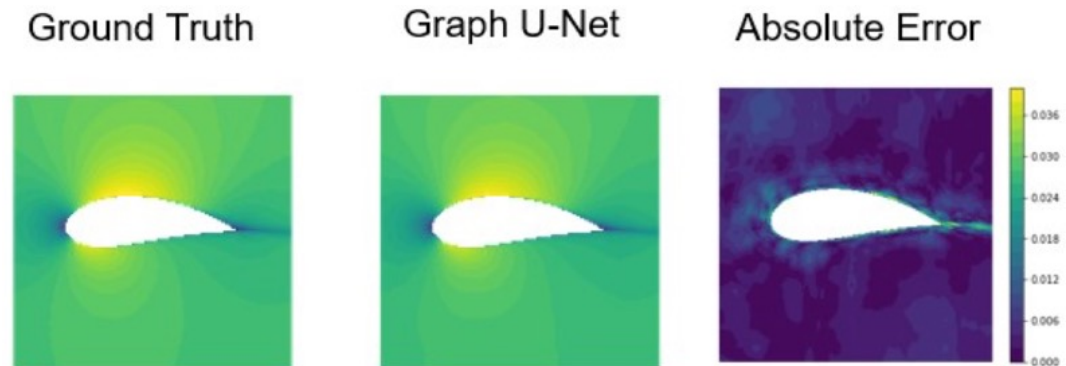
Projet HSA : simulation et deep learning sur graphes

Graph Nets pour les maillages 3D
Plus adaptés, car opèrent par
construction sur des graphes



Prédiction du profil d'écoulement d'air
autour d'une aile d'avion (Air Foil)

Physique : équation de Navier-Stokes

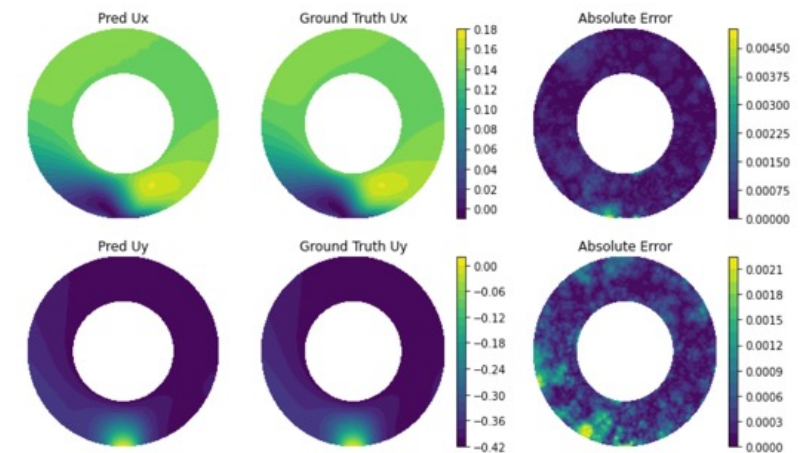
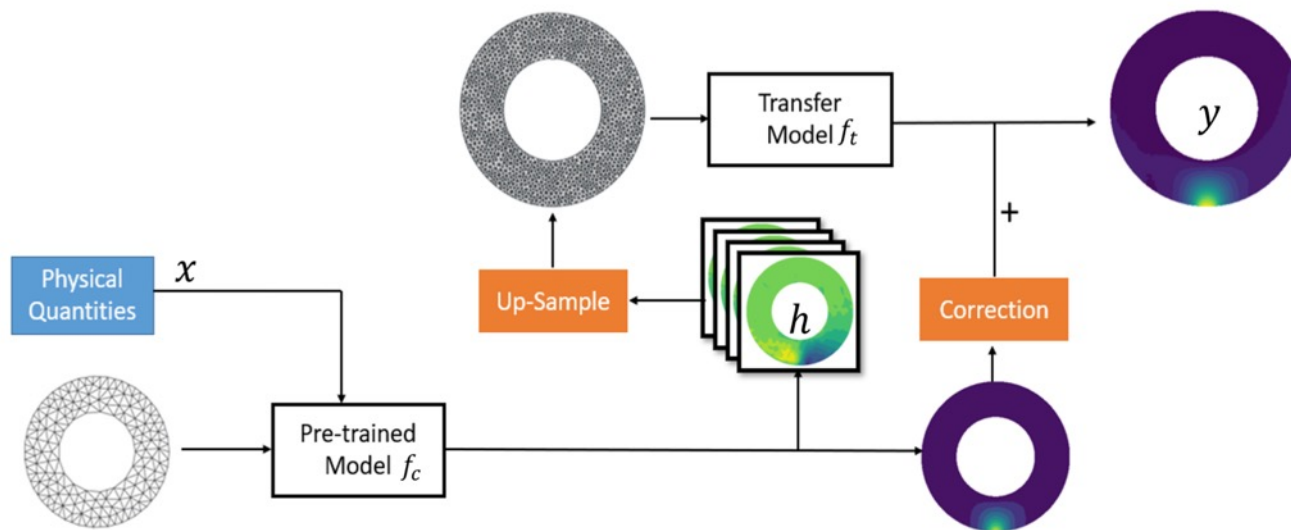


Projet HSA : Hybridation pour le transfert learning

- Caractère générique des modèles appris
- Possibilités d'améliorer les résultats grâce à l'apprentissage par transfert
- Passage à une haute-fidélité (maillage fin) à partir d'une fidélité basse (maillage moins fin) et amélioration des prédictions

Profil du contact de pneu

Physique : équation de contact



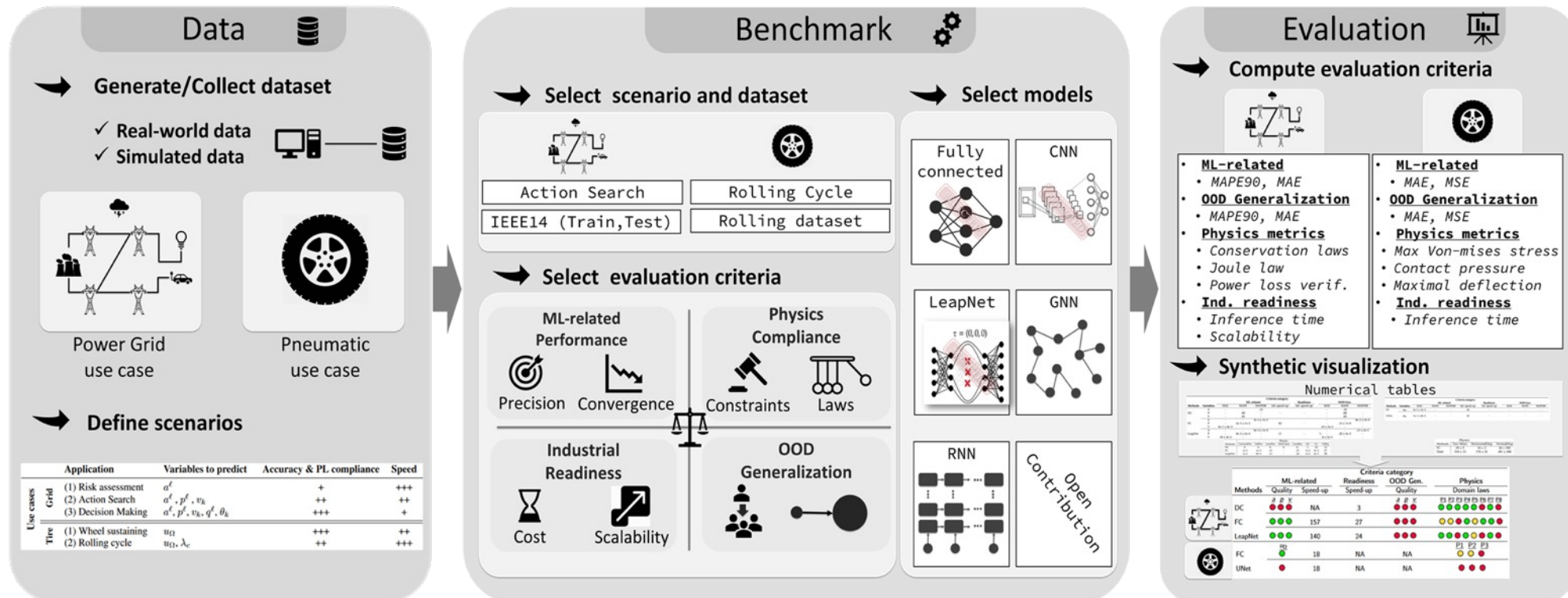
Travaux de thèse de W. Liu, 2023 (LISN, Inria/SystemX)

Projet HSA : La validation des modèles hybrides

LIPS : Évaluation des simulateurs physiques augmentés par l'IA

Résultat du projet HSA-IA2

- 1st framework for evaluating augmented physical simulators
- Published at NeurIPS2022 conference
- 7 use cases integrated
- Open-source Framework <https://github.com/IRT-SystemX/LIPS>



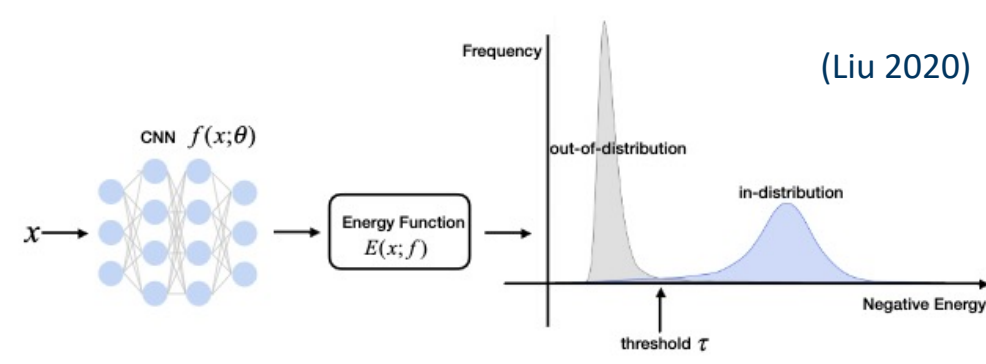
Des sujets à faire progresser

Quantification d'incertitude

- ➔ La **UQ** devrait être inhérente aux modèles et systèmes d'ingénierie hybrides
 - quantifier et garantir des performances désirables en matière d'apprentissage et de prédiction, en caractérisant et contrôlant le biais lié aux données et celui lié aux modèles,
 - e.g., à travers des architectures profondes dotées de constructions probabilistes pour détecter des écarts de distribution (OOD)
- ➔ Les applications directes : détection d'anomalies, surveillance (monitoring)

Passage à l'échelle

- ➔ Entraînement parallèle, GPU...
- ➔ Eg. En Simulation multi-échelles, ...

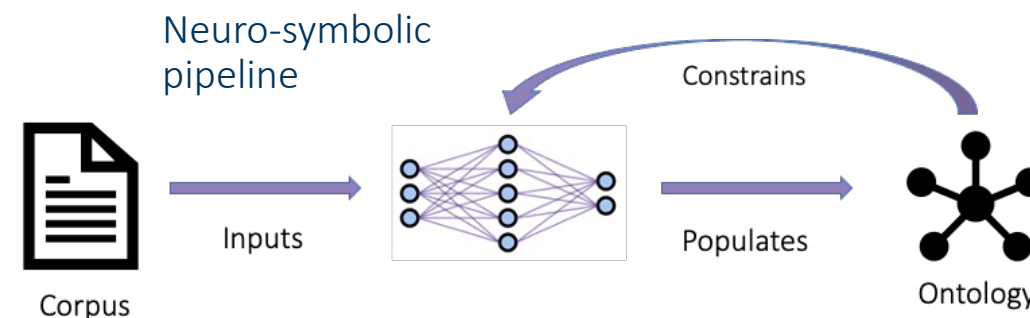
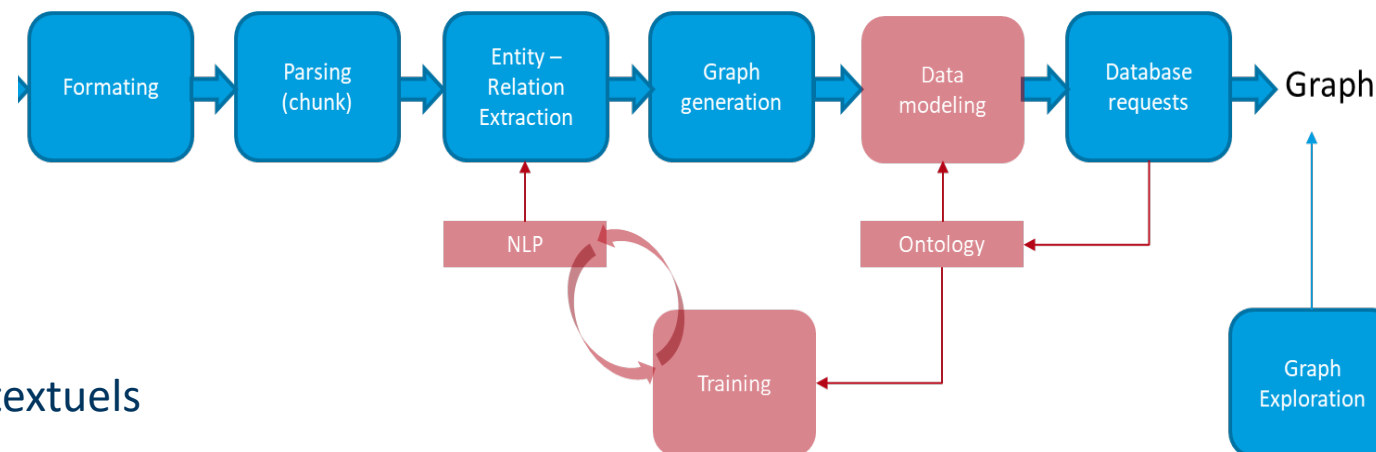


Cadre:

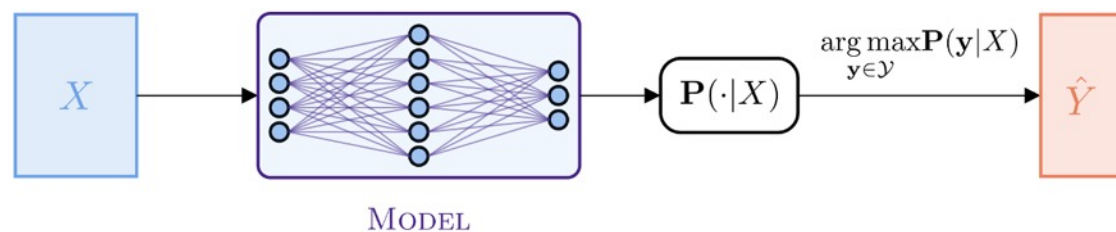
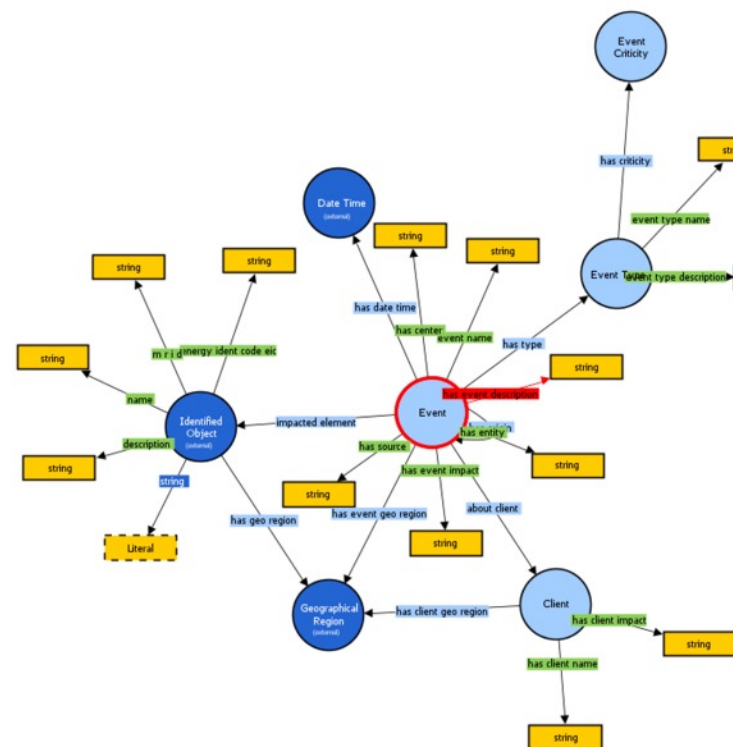
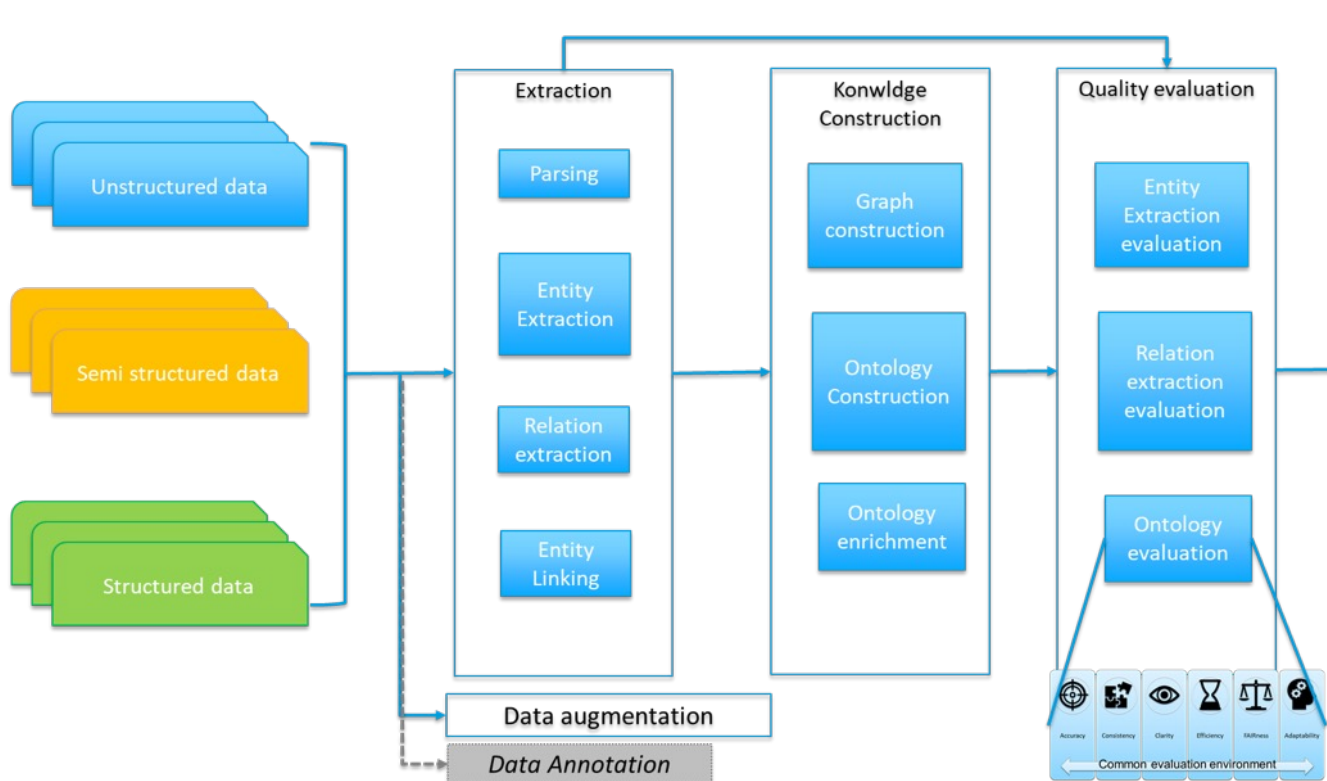
Construction de graphe
de connaissances à partir de
données textuelles métier

Approche

- Extraction d'information à partir de corpus textuels hétérogènes structurés, semi-structurés...: Approche NLP; Annotation sémantique
- Construction de graphes de connaissances et d'ontologies avec un sens métier
- Proposition de vues synthétiques et ciblées sur ces connaissances



Projet SMD : Sémantique Métier pour l'exploitation de Données multi-sources

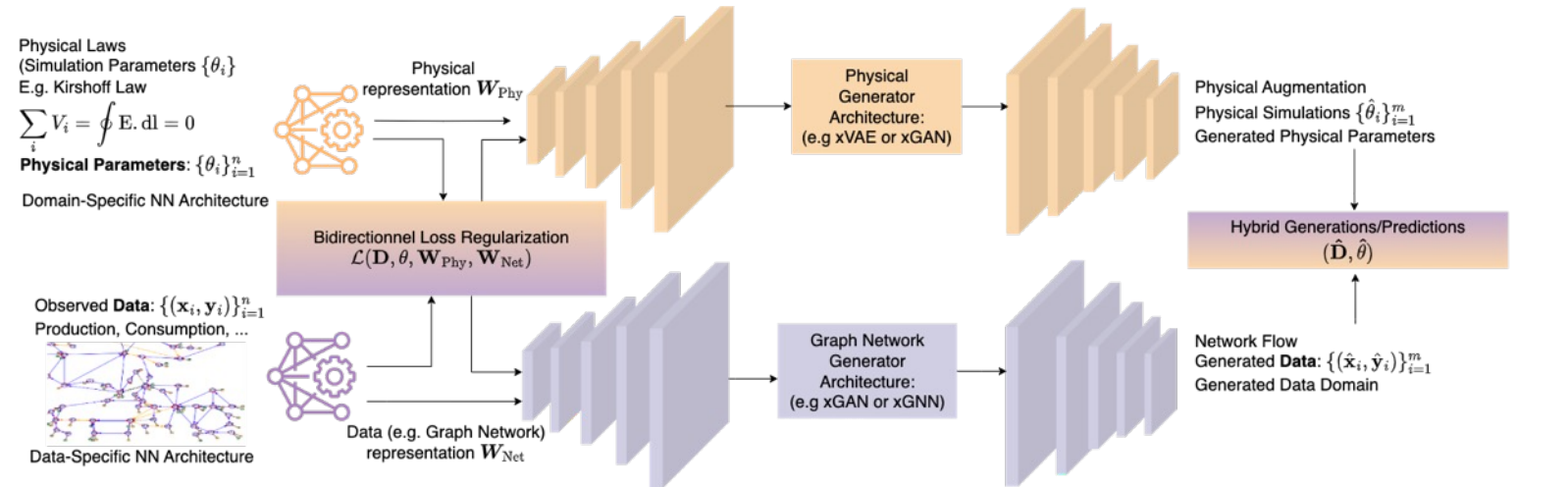


=> Insertion de règles logiques en inférence:

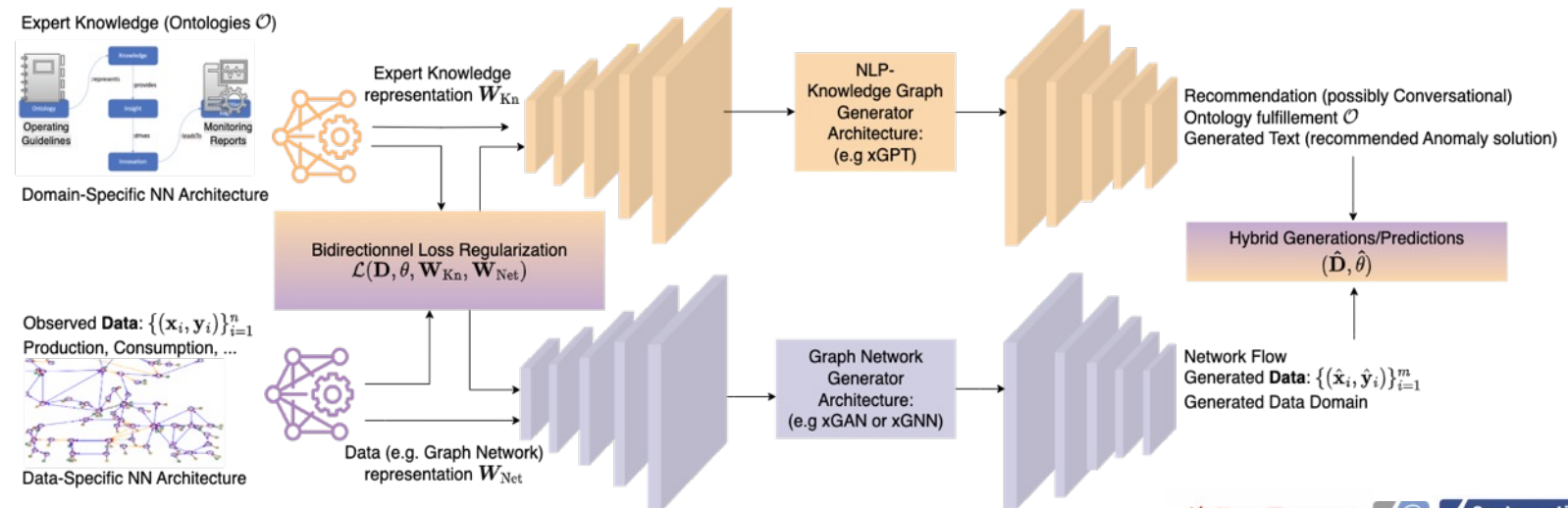
- Recalculer $P(y|X, \alpha)$ au lieu de $P(y|X)$ apprise
- α étant une règle sur la validité de la prédiction $\hat{y}$

IA Générative Hybride : un sujet à amorcer

- En vue de l'augmentation de données pour alimenter l'apprentissage et réduire le coût de la simulation physique



- Pour la prise en compte des savoirs-faires et des sémantiques métier dans l'IA générative de type LLMs



IA Hybride : l'écosystème

IA Hybride, quelques acteurs sur Paris-Saclay

- **Inria** - groupe de travail **SNAP!**
- Le laboratoire **LISN** département « Algorithmes, Apprentissage et calculs »,
- Le laboratoire **MICS**
- **L'IRT SystemX** (programmes [IA2](#), [Confiance.ai](#))
- L'association **Teratec**
- Le laboratoire **LTCI**
- Le Laboratoire **LMPS**
- La **Maison de la Simulation**
- Le **GIS UQ LARTISSTE**: <https://uq-at-paris-saclay.github.io>



L'IA Hybride, quelques évènements locaux à venir

- **AI, Data, Robotics Forum (ADRA)**

Workshop « Leveraging AI-based Physical Simulation for Industry »

Le 8-9/11/2023, Versailles. <https://adrforum.eu/>



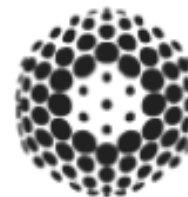
- **Challenge « Machine Learning for Physical Simulation Challenge »**

Ouverture le 14/11/23 avec SystemX, Extrality, NVIDIA, Exaion, RTE, INRIA, Sorbonne Université, TAILOR, CRITEO, sur la plateforme Codabench

Warm-up phase: November 6th- December 3rd

Development phase December 4th - January 28th

Surveiller la page de l'IRT: <https://www.irt-systemx.fr/agenda>



- **Artificial Intelligence Advanced Engineering (AIAE'2023)**

7/12/2023 à Saclay, avec SystemX, Ifpen, DataIA, Systematic

Deadline des abstracts 6/11

<https://aiae23.sciencesconf.org/>



L'IA Hybride, quelques évènements à venir

- **Workshop on Physics Informed Learning**

4-5/12/2023, Institut de Math de Toulouse, <https://www.gdr-mascotnum.fr/dec23.html>

- **International Conference on Scientific Computing and Machine Learning**

19-23/3/2024. Kyoto, <http://www.scml.jp/index.html>

- **GdR RADIA, GT MHyIA**

Évènement récent (19/9/23) : IA neuro-symbolique, Arras

<https://afia.asso.fr/les-journees-communes/afia-radia-2023/>

- **Aniti Days 2023**

16-17/11/2023. <https://aniti.univ-toulouse.fr/2023/09/29/aniti-days-2023-les-journees-scientifiques-daniti/>

- **Hybrid Human Artificial Intelligence (HHAI) 2024**

June 10-14 2024, Malmö, Sweden, <https://hhai-conference.org/2024/>

- **International Conference on Learning Representations**

7-11/5/2024 Vienna, <https://iclr.cc/Conferences/2024/CallForPapers>

- **The Knowledge Graph Conference**

6-10/5/2024, Cornell Tech NYC, <https://cvent.me/Zv58o0>

Quelques références

General hybrid

- Wang & al. (2023). Scientific discovery in the age of artificial intelligence. Nature, 620
- L. von Rueden et al. (2023) Informed Machine Learning – A Taxonomy and Survey of Integrating Prior Knowledge into Learning Systems, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, vol. 35(1)

Physique/Simulation et ML

- Bronstein, M. M. & al. (2017) Geometric deep learning: going beyond euclidean data. IEEE Signal Process Mag. 34
- Arjona Martínez, J., et al. (2019) Pileup mitigation at the Large Hadron Collider with graph neural networks. Eur. Phys. J. Plus 134, 333
- Monti, F., et al. (2016): Geometric deep learning on graphs and manifolds using mixture model CNNs, CVPR.
- Davies, A. et al. (2021) Advancing mathematics by guiding human intuition with AI. Nature 600
- Raissi, M et al. (2019) Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. Journal of Computational Physics. 378
- Liu et al. (2020), Energy-based Out-of-distribution Detection, NeurIPS
- E. Menier, et al. (2023) CD-ROM: Complemented Deep - Reduced order model. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol 410.

Connaissances/Symbolique et ML

- T. Laugel et al. (2019) The Dangers of Post-hoc Interpretability: Unjustified Counterfactual Explanations. Int.Joint Conference on Artificial Intelligence
- A. Pirovano, et al. (2021) Computer aided diagnosis tool for cervical cancer screening with weakly supervised localization and detection of abnormalities using adaptable and explainable classifier. Medical Image Analysis, 73
- M. Charachon et al. (2020), Combining similarity and adversarial learning to generate visual explanation : Application to medical image classification. ICPR
- K. Marino et al. (2017) The more you know: Using knowledge graphs for image classification, Conf. Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)
- P. W. Battaglia et al. (2018) Relational inductive biases, deep learning, and graph networks,” arxiv:1806.01261
- E. Marconato et al. (2022) GlanceNets: Interpretable, Leak-proof Concept-based Models. Neurips
- G. Audemard, et al. (2023) Deriving Explanations for Decision Trees: The Impact of Domain Theories. hal-04176274
- J. Ott et al. (2023) How to Think About Benchmarking Neurosymbolic AI? 17th Intern. Workshop on Neural-Symbolic Learning and Reasoning (NeSy)