



Quantification des incertitudes en Machine Learning couplé à la physique

Adresse courriel du contact scientifique : herve.chauris@mines-paristech.fr

Description du projet de thèse :

Récemment, des approches ont été proposées pour coupler *Machine Learning* et *Physique* (en anglais *Physics-Informed Machine Learning*). D'un côté, le Machine Learning a les capacités d'extraire des informations parfois cachées dans les données. D'un autre côté, ces informations ne respectent pas toujours les lois de la physique. C'est une forte limitation, mais en même temps une occasion d'aller plus loin dans l'exploitation des données. L'objectif des PINNs (*Physics-Informed Neural Networks*) est de mettre à jour les poids du réseau neuronal pour à la fois satisfaire les données et les lois de la physique (Raissi et al., 2019).

L'objectif de la thèse est de *quantifier les incertitudes dans le cadre des PINNs*. Actuellement, à partir d'une solution initiale, l'entraînement du réseau converge vers une solution déterministe. L'utilisation d'un gradient stochastique est un peu plus générale, mais une seule solution est trouvée, sans incertitudes associées. Pour ce faire, nous proposons de repenser les PINNs dans un cadre Bayésien pour arriver à un ensemble de solutions.

Les applications visées concernent l'imagerie sismique des structures complexes. L'approche traditionnelle (sans Machine Learning) est celle de l'inversion des formes d'onde (Chauris, 2019). L'approche Bayésienne est d'autant plus pertinente que l'inversion des formes d'onde converge généralement vers un minimum secondaire dans les approches déterministes. L'objectif du travail est de montrer en quoi les approches PINNs permettent de s'affranchir de ces minima secondaires et d'obtenir les distributions a posteriori des différents champs de paramètres (vitesse, densité) qui influencent la propagation des ondes.

Les validations se feront sur des données synthétiques et des données réelles.

Quantifying Uncertainties in Physics-Informed Machine Learning

Research project outline :

Recently, Physics-informed Neural Networks (PINN) have been proposed to explicitly introduce the Physics inside Machine Learning. On one side, Machine Learning is able to extract information out of the data. On the other side, the conclusions are not always consistent with the physics. This is a strong limitation, but it offers the possibility to extend the capabilities of Machine Learning. The objective of the of PINN approaches is to update the weights of the neural network to fit the observed data and to obey to the physics (Raissi et al., 2019).

The objective of the PhD work is to quantify the PINN uncertainties. From a starting initial solution, the network learning leads currently towards a deterministic solution. The stochastic gradient is more general, but a unique solution is determined, without uncertainties. Here, we propose to recast the PINN in a Bayesian context to derive a posterior probability.

The applications are related to seismic imaging. The traditional approach (without Machine Learning) is the Full Waveform Inversion (Chauris, 2019). The Bayesian approach is here pertinent, as Full Waveform Inversion may easily converge towards a local minimum with the deterministic approaches. The objective is to demonstrate on synthetic

and real data sets how the PINN strategy could avoid these local minima and to obtain the posterior probability density functions for different parameters (velocity, density) influencing the wave propagation.

Références

Chauris, H. (2019). Full Waveform Inversion, in *Seismic Imaging, a practical approach*, J-L. Mari and M. Mendes (Eds.), EDP Sciences, chapter 5, 23 p., ISBN (ebook): 978-2-7598-2351-2, doi:10.1051/978-2-7598-2351-2.c007

Raissi, M., P. Perdikaris, G.E. Karniadakis (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**, 686-707

Compétences et connaissances requises :

Le/la candidat(e) doit avoir de très bonnes bases en mathématiques et en physique. Il/elle doit avoir un fort intérêt pour le Machine Learning et un goût pour les applications à l'imagerie géophysique du sous-sol, tout particulièrement avec les méthodes sismiques. Il/elle doit aussi avoir une très bonne expérience en programmation informatique. Un plus est d'avoir une expérience en calcul parallèle (HPC). Le/la candidat(e) doit maîtriser l'anglais, tant à l'écrit qu'à l'oral.