

Identification non supervisée de lois de comportement par réseaux de neurones dans un cadre thermodynamiquement cohérent

N. Klebi¹, L. Chamoin¹

¹ Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMPS - Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay
4, avenue des Sciences, 91190 Gif-sur-Yvette, web page: <https://lmeps.ens-paris-saclay.fr/fr>
{nesrine.klebi, ludovic.chamoin}@ens-paris-saclay.fr

Résumé — Cet article traite de l'identification des lois de comportement, en allant d'approches parcimonieuses à des approches d'apprentissage, et est fondé sur la minimisation de l'erreur en relation de comportement modifiée (mCRE). Les lois de comportement sont étudiées dans le cadre des matériaux standards généralisés, en termes de lois d'état et d'équations d'évolution, et vérifient par construction les principes de la thermodynamique. Les méthodes d'identification sont illustrées par des données de déformation viscoélastiques synthétiques et réelles, issues d'une loi de Maxwell généralisée et de mesures DIC sur un matériau endovasculaire.

Mots clés — Viscoélasticité, Identification parcimonieuse, Erreur en relation de comportement modifiée, Réseaux de neurones augmentés par la physique

1 Introduction

Les structures mécaniques sont constituées de matériaux au comportement souvent complexe. Pour suivre de manière fiable l'intégrité de ces structures, les simulations numériques de leur réponse mécanique doivent reproduire fidèlement ce comportement, ce qui nécessite l'utilisation de modèles de comportement thermodynamiquement cohérents. Classiquement, ces modèles sont calibrés à partir de données expérimentales acquises sur des structures instrumentées au moyen de méthodes inverses.

La calibration par méthode inverse suit deux voies principales. Dans la première, on postule une forme analytique pour la loi de comportement, puis on ajuste ses paramètres aux données expérimentales. Ces modèles restent interprétables, mais peuvent ne pas reproduire des réponses matériaux complexes. Dans la seconde, on recourt à des approches dites « data-driven », qui cherchent à identifier directement la loi à partir des données, sans hypothèse préalable sur sa forme fonctionnelle [1, 2].

L'étude de ces approches dans un cadre thermodynamiquement cohérent, fondé sur des potentiels d'énergie convexes, permet de renforcer la plausibilité physique des modèles obtenus. Cependant, la plupart supposent encore a priori la forme de ces potentiels ainsi que le nombre et la nature des variables internes, ce qui limite leur portée dans des situations réelles où ces informations ne sont pas connues.

Dans cette étude, nous abordons cette difficulté en recourant d'abord à une stratégie d'identification parcimonieuse fondée sur une régularisation de type Lasso, qui sélectionne automatiquement les seules variables internes nécessaires à une description physiquement pertinente du matériau, tout en annulant les contributions superflues. La méthode est d'abord analysée sur des données de déformation synthétiques issues de la simulation d'un matériau viscoélastique de type Maxwell généralisé, en prolongement de l'approche EUCLID présentée dans [3], puis appliquée à des données expérimentales obtenues par corrélation d'images numériques (DIC) lors d'essais uniaxiaux et biaxiaux réalisés sur une machine d'essais dédiée, visant à améliorer le traitement endovasculaire de lésions aortiques par simulation chirurgicale réaliste. L'étude porte sur des fantômes aortiques imprimés en 3D à partir d'images médicales et constitués d'élastomères multimatériaux.

Cette étude sur les données réelles sert ensuite de base à une seconde approche d'identification par apprentissage, fondée sur des réseaux de neurones [1] visant à apprendre simultanément les potentiels d'énergie et les variables internes. Ces dernières sont utilisées comme entrées explicites du réseau, sans hypothèses structurales prédéfinies [1, 2]. Le cadre reste thermodynamiquement cohérent et est piloté par l'Erreur en Relation de Comportement modifiée (mCRE), qui fournit une fonction coût physiquement

fondée à partir de mesures de champ et intégrant le bruit de mesure.

L'ensemble de ces développements illustre la robustesse et la polyvalence du cadre proposé, qui combine modélisation physique, indicateurs d'erreur et apprentissage automatique pour l'identification non supervisée de lois de comportement.

2 Cadre des matériaux standards généralisés

En mécanique des milieux continus, le comportement d'un corps fini soumis à des chargements externes peut être décrit soit dans une formulation mécanique, soit dans une formulation thermodynamique. La formulation mécanique impose les conditions d'admissibilité cinématique et statique, établit les équations d'équilibre et postule des lois de comportement sans garantir nécessairement la cohérence thermodynamique. À l'inverse, la formulation thermodynamique repose sur les mêmes équations d'équilibre, mais exige en plus que les relations de comportement satisfassent la seconde loi de la thermodynamique. Dans le cadre des matériaux standards généralisés (GSM), cette cohérence est assurée en construisant les lois de comportement à partir d'un potentiel d'énergie libre et d'un potentiel de dissipation, ce qui garantit par construction l'admissibilité thermodynamique.

Les problèmes d'évolution non linéaire, tels que le comportement viscoélastique étudié dans ce travail, impliquent l'évolution temporelle de variables d'état, généralement réparties en composantes observables et internes. Le cadre des matériaux standards généralisés (GSM), tel que défini dans [4], est particulièrement bien adapté à ce type de problèmes, car il fournit une méthodologie systématique pour établir des modèles de comportement thermodynamiquement admissibles pour des phénomènes irréversibles, tout en garantissant des propriétés mathématiques souhaitables telles que la convexité et la stabilité.

Dans le cadre de GSM, le comportement d'un matériau viscoélastique général est décrit par une énergie libre de Helmholtz $\psi(\varepsilon_e, \mathbf{X})$, où ε_e désigne le tenseur de déformation élastique et $\mathbf{X} = (X_k)_{k=1}^K$ un ensemble de variables internes, chacune associée à un mécanisme visqueux distinct. La déformation visqueuse est définie par $\varepsilon_v = \sum_{k=1}^K X_k$, ce qui conduit, en petits déplacements, à une décomposition additive du tenseur de déformation totale $\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_v$. L'hypothèse de convexité de ψ permet de satisfaire automatiquement l'inégalité de Clausius–Duhem.

Pour décrire l'évolution des variables internes, on introduit un potentiel de dissipation $\phi(\dot{\mathbf{X}})$, comme expliqué en [5]. Ce potentiel est supposé convexe, non négatif et nul à l'origine, ce qui garantit la positivité de la dissipation $\mathcal{D} = \mathbf{Y} \cdot \dot{\mathbf{X}} = \sum_{k=1}^K Y_k : \dot{X}_k$, où $\mathbf{Y} = (Y_k)_{k=1}^K$ est le vecteur des forces thermodynamiques, avec $Y_k = \frac{\partial \psi}{\partial X_k}$.

La relation entre les forces thermodynamiques et l'évolution des variables internes est en général non triviale, en particulier lorsque le modèle de comportement est exprimé sous forme implicite. Pour clarifier cette relation, on introduit la notion de potentiels duaux via la transformée de Legendre–Fenchel (voir [7]). Ces formulations duelles offrent une description alternative mais équivalente du comportement du matériau, en échangeant les rôles des variables d'état et de leurs forces conjuguées. Les potentiels d'énergie et de dissipation duaux sont définis par

$$\psi^*(\mathbf{s}) = \sup_{\mathbf{e}_e} [\mathbf{s} \cdot \mathbf{e}_e - \psi(\mathbf{e}_e)], \quad \phi^*(\mathbf{s}) = \sup_{\dot{\mathbf{X}}} [\mathbf{Y} \cdot \dot{\mathbf{X}} - \phi(\dot{\mathbf{X}})],$$

où $\mathbf{e}_e = [\varepsilon_e, \mathbf{X}]$ est le vecteur global des variables d'état et dissipatives, et $\mathbf{s} = [\sigma^e, \mathbf{Y}]$ le vecteur des forces thermodynamiques.

3 Concept de la CRE pour des matériaux non linéaires dépendant du temps et de l'histoire

Le cadre de l'Erreur en Relation de Comportement (CRE) a été initialement introduit par Pierre Lavèze dans le contexte des problèmes directs, avec pour objectif d'estimer les erreurs de discrétisation dans les simulations par éléments finis (EF), comme présenté dans [6]. L'idée clé est qu'une solution EF conforme fournit un champ de déplacement $\mathbf{u}_h \in U_{\text{ad}}$, qui approche la solution exacte $\mathbf{u} \in U_{\text{ad}}$. Cependant, le champ de contraintes associé σ_h , bien qu'admissible au sens EF, n'appartient en général pas à l'ensemble S_{ad} des champs de contraintes strictement statiquement admissibles.

La CRE est évaluée *a posteriori* en reconstruisant un champ de déplacements cinématiquement admissible $\hat{\mathbf{u}} \in U_{\text{ad}}$, typiquement à partir de \mathbf{u}_h , et un champ de contraintes statiquement admissible $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in S_{\text{ad}}$. Ces champs reconstruits sont ensuite utilisés pour mesurer l'écart à la loi de comportement via une formulation en énergie complémentaire. Pour les problèmes d'élasticité, la CRE est définie par :

$$\varepsilon_{\text{CRE}}^2(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \int_{\Omega} (\psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})) + \psi^*(\hat{\boldsymbol{\sigma}}) - \hat{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})) d\Omega$$

Avec un potentiel quadratique ψ décrivant la loi de Hooke ($\psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{K} : \boldsymbol{\varepsilon}$, $\psi^*(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{K}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}$), la loi de comportement en élasticité linéaire s'écrit $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{K} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$, et la CRE devient :

$$\varepsilon_{\text{CRE}}^2(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \int_{\Omega} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})) : \mathbf{K}^{-1} : (\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})) d\Omega = \int_{\Omega} \|\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})\|_{\mathbf{K}^{-1}}^2 d\Omega$$

où $\|\cdot\|_{\mathbf{K}^{-1}}$ désigne la norme d'énergie induite par \mathbf{K}^{-1} sur les champs de contraintes. Cette expression montre clairement que la CRE quantifie la violation de la loi de comportement pour toute paire admissible.

Le cadre CRE a ensuite été étendu aux matériaux non linéaires dépendant du taux et de l'histoire. Dans ce contexte, l'estimateur d'erreur est formulé pour un état admissible $\hat{s} = (\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e, \hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}})$ comme suit :

$$\varepsilon_{\text{CRE}}^2(\hat{s}) = \int_0^T \int_{\Omega} \eta_{\psi}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\mathbf{X}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e, \hat{\mathbf{Y}}) d\Omega dt + \int_0^T \int_0^t \int_{\Omega} \eta_{\varphi}(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}) d\Omega ds dt$$

avec

$$\begin{aligned} \eta_{\psi}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\mathbf{X}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e, \hat{\mathbf{Y}}) &= \psi^*(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_e, \hat{\mathbf{Y}}) + \psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\mathbf{X}}) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e - \hat{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{X}} \\ \eta_{\varphi}(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}) &= \varphi^*(\hat{\mathbf{Y}}) + \varphi(\hat{\mathbf{X}}) - \hat{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{X}} \end{aligned}$$

De nombreux problèmes mécaniques impliquant l'identification de paramètres à partir de mesures expérimentales, le cadre CRE a naturellement été étendu au contexte des problèmes inverses, comme décrit dans [6]. Dans ce cadre, les potentiels ψ , ψ^* , φ et φ^* sont exprimés en fonction d'un vecteur de paramètres \mathbf{p} , et l'objectif est d'identifier les valeurs optimales \mathbf{p}_{opt} en minimisant la CRE, qui joue alors le rôle de fonction objectif pilotée par les données.

3.1 Extension au concept de mCRE

Le concept de CRE a été utilisé avec succès pour l'identification de paramètres de modèles de comportement prescrits à partir de données expérimentales. Dans sa formulation classique, les mesures, typiquement des déplacements ou des déformations, sont imposées dans l'espace cinématiquement admissible, de sorte que les champs admissibles sont partiellement contraints à reproduire les observations. Si cette stratégie est efficace dans des conditions idéales, elle présente toutefois une faible robustesse lorsque les mesures sont bruitées, car elle peut conduire à un sur-ajustement de données peu fiables.

Pour remédier à cette limitation, la méthode de l'erreur en relation de comportement modifiée, la mCRE, introduit un mécanisme de relaxation. Plutôt que d'imposer strictement les observations dans l'espace des champs admissibles, la mCRE n'impose de manière forte que les composantes jugées fiables des données. Les mesures incertaines ou bruitées sont traitées comme des contraintes souples, ce qui permet à l'identification de rester cohérente à la fois avec la physique du modèle et avec le niveau de confiance associé aux observations expérimentales. Cette section rappelle les bases de la mCRE pour des problèmes dépendant du taux et de l'histoire.

Le problème inverse consiste à déterminer les paramètres optimaux \mathbf{p}_{opt} (intervenant dans les potentiels thermodynamiques) tels que :

$$\mathbf{p}_{\text{opt}} = \arg \min_{\mathbf{p}} \left[\min_{\hat{s} \in \mathcal{A}_d} \varepsilon_{\text{CRE}}^2(\hat{s}; \mathbf{p}) \right]$$

avec

$$\varepsilon_{\text{mCRE}}^2(\hat{s}; \mathbf{p}) = \varepsilon_{\text{CRE}}^2(\hat{s}; \mathbf{p}) + \frac{\alpha}{2} \int_0^T \|\mathbf{\Pi} \mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{obs}}\|^2 dt \quad (1)$$

où $\mathcal{A}_d = (\mathcal{U}_{ad} \times \mathcal{S}_{ad})$ (même s'il est possible de considérer les chargements comme incertains), α est un facteur d'échelle, et $\mathbf{\Pi}$ est le projecteur de \mathbf{u} sur les grandeurs mesurées.

La minimisation de la mCRE est réalisée au moyen d'un processus itératif dans lequel, à chaque itération :

- à l'Étape 1, on calcule une solution admissible optimale $\hat{s}^{(n+1)}$ pour les paramètres courants $\mathbf{p}^{(n)}$ telle que :

$$\hat{s}^{(n+1)} = \arg \min_{s \in \mathcal{A}_d} \left[\epsilon_{\text{mCRE}}^2(s; \mathbf{p}^{(n)}) \right]$$

- à l'Étape 2, les paramètres du modèle de comportement sont mis à jour par une méthode de descente de gradient pour obtenir $\mathbf{p}^{(n+1)}$.

4 Réseaux de neurones thermodynamiquement cohérents pour l'apprentissage de lois de comportement

Les sections précédentes ont présenté le cadre général de l'étude (GSM) ainsi que le concept de la mCRE. Ce cadre s'applique aussi bien à l'identification de paramètres qu'à l'apprentissage de lois de comportement par réseaux de neurones, comme discuté par Benady et al. [2], celles-ci étant formulées à partir de potentiels thermodynamiques ψ et ϕ , conformément au cadre GSM. La stratégie d'identification est donc illustrée en Figure 1 pour un matériau décrit par un potentiel thermodynamique ψ , afin d'en expliciter les principes.

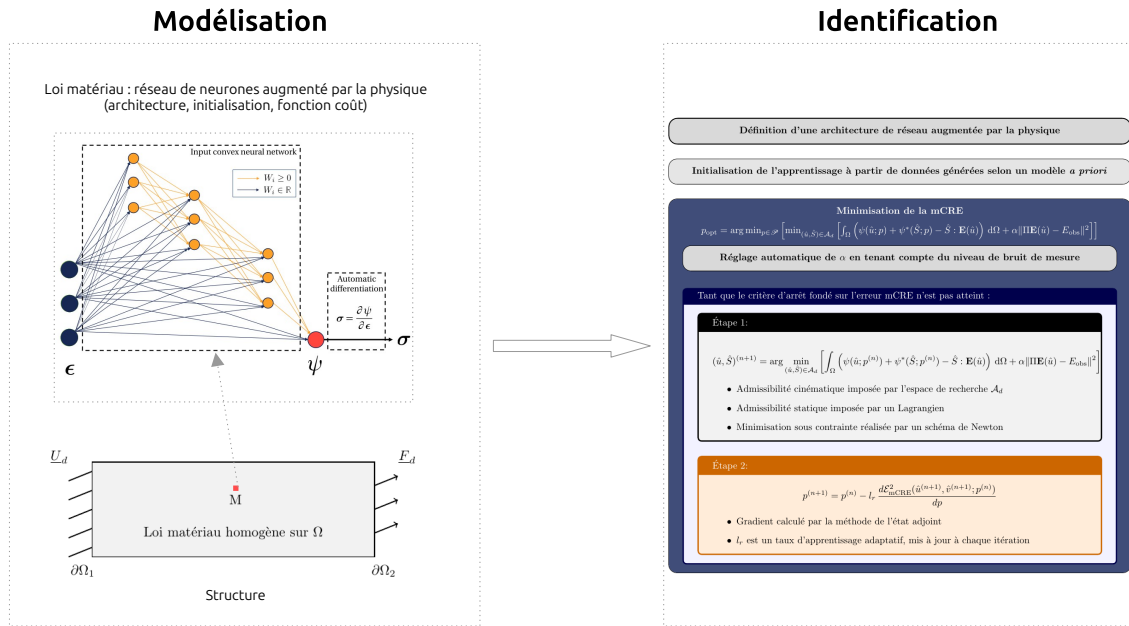


FIGURE 1 – Schéma de la stratégie d'identification par minimisation de la mCRE avec réseau de neurones augmenté par la physique

4.1 Imposer les contraintes thermodynamiques dans l'architecture

L'idée générale est alors d'approximer des potentiels thermodynamiques convexes (énergie libre et dissipation) afin de garantir la conformité au second principe de la thermodynamique, d'où le choix d'Input Convex Neural Networks (ICNN). Dans [2], ces réseaux sont illustrés sur une loi d'érouissage non linéaire à partir de données synthétiques issues de fibres optiques.

La spécificité de l'ICNN est de garantir la convexité par rapport aux entrées grâce à des contraintes imposées à son architecture : couche d'entrée connectée à toutes les couches cachées ainsi qu'à la couche de sortie, fonctions d'activation convexes et non décroissantes, et contraintes de positivité sur certains poids intermédiaires. La positivité du potentiel de dissipation est ensuite imposée par le choix de fonctions d'activation positives.

Comme la composition d'une fonction convexe avec une fonction convexe non décroissante reste convexe, et que la somme de fonctions convexes est également convexe, cette architecture garantit la convexité de la fonction apprise par le réseau.

Enfin, pour imposer une valeur nulle à l'origine (par exemple pour un potentiel de dissipation vérifiant $f(0) = 0$), on recentre simplement la fonction. Pour n'importe quelle fonction f , on définit

$$\tilde{f}(x) = f_{\text{NN}}(x) - f_{\text{NN}}(0),$$

où $f_{\text{NN}}(x)$ est la sortie du réseau de neurones évaluée en x . Cette opération ne modifie pas la convexité, puisqu'on soustrait une constante.

4.2 Initialisation du réseau

Avant l'apprentissage, une connaissance partielle du modèle est souvent disponible. Avant la minimisation de la mCRE, une phase d'initialisation (pré-entraînement) est effectuée, au cours de laquelle le réseau est ajusté pour reproduire au mieux ces informations. Parmi plusieurs essais, l'ensemble de paramètres le plus pertinent est sélectionné comme point de départ de l'optimisation, ce qui réduit la sensibilité à une initialisation aléatoire.

4.3 Minimisation de la fonction de coût

L'étape suivante consiste à minimiser la fonction de coût de l'ICNN, qui est ici l'Erreur en Relation de Comportement modifiée (mCRE), de forme donnée par l'équation (1). Cette fonction comporte un terme de dissimilarité aux données, pondéré par un coefficient α . Classiquement, la minimisation est réalisée en deux étapes : à l'étape 1, on recherche les champs admissibles de déplacement et de contraintes pour les poids courants du réseau $\mathbf{p}^{(n)}$; à l'étape 2, on effectue un pas de descente de gradient afin de mettre à jour les poids du réseau de neurones initialement conçu :

$$\mathbf{p}^{(n+1)} = \mathbf{p}^{(n)} - l_r \frac{d\varepsilon_{\text{mCRE}}^2(\hat{u}^{(n+1)}, \hat{v}^{(n+1)}; \mathbf{p}^{(n)})}{dp}$$

4.4 Réglage des hyperparamètres

Réglage de la pondération entre les fonctions de coût

La fonctionnelle mCRE fournit une interprétation physique qui guide le choix du paramètre α . Le modèle est ajusté jusqu'à ce que l'écart entre prédictions et observations soit du même ordre que le niveau de bruit dans les données, conformément au principe de Morozov. Cette stratégie suppose une estimation *a priori* du bruit, et le paramètre α est adapté au cours de l'apprentissage pour satisfaire ce critère.

Réglage du taux d'apprentissage

Un autre paramètre crucial de l'entraînement des réseaux de neurones est le choix du taux d'apprentissage, noté l_r . Une valeur trop faible conduit à une convergence très lente, tandis qu'une valeur trop élevée peut rendre l'optimisation instable et empêcher la convergence. La sélection de l_r peut être affinée à partir de l'analyse des progrès obtenus sur une seule phase d'entraînement.

4.5 Critère d'arrêt de l'entraînement

L'entraînement des réseaux de neurones nécessite la définition d'un critère d'arrêt. La mCRE fournit un cadre physique pertinent pour cela : le terme de CRE peut être interprété comme une erreur de modèle et, puisqu'il est homogène à une énergie, il peut être comparé à l'énergie présente dans la structure. Le critère retenu consiste à fixer une valeur cible d'erreur de modèle normalisée et à interrompre l'entraînement dès que ce seuil est atteint.

4.6 Apprentissage des variables internes

Les variables internes sont traitées comme des *entrées explicites* du réseau. Un ensemble candidat \mathbf{X} est d'abord défini à partir de considérations physiques et/ou de méthodes parcimonieuses (par exemple une régularisation de type Lasso), puis utilisé comme entrée du réseau ICNN, en complément des grandeurs observables, de sorte que les potentiels thermodynamiques sont approchés sous la forme :

$$\Psi_{\text{NN}} = \Psi_{\text{NN}}(\varepsilon_\ell, \mathbf{X}), \quad \Phi_{\text{NN}} = \Phi_{\text{NN}}(\dot{\mathbf{X}})$$

La minimisation de la mCRE sert de fonction coût pour ajuster les poids du réseau et évaluer la pertinence de chaque composante de \mathbf{X} . Les composantes peu actives peuvent être écartées, tandis que les variables contribuant significativement à la diminution de la mCRE sont conservées et interprétées comme variables internes effectives du modèle.

5 Résultats préliminaires

Cette section présente quelques résultats numériques très préliminaires obtenus à partir de données synthétiques, dans le cadre de l'identification du comportement viscoélastique.

5.1 Identification parcimonieuse avec la régularisation Lasso

Le matériau de référence est un modèle de Maxwell généralisé comprenant cinq branches viscoélastiques en parallèle d'une branche à durée de relaxation infinie. Le cas étudié est un problème unidimensionnel : une barre encastree à gauche, sur laquelle on impose une contrainte à droite. Cette barre est modélisée avec un élément fini possédant un seul point de Gauss.

À partir de ce modèle « vrai », une courbe de déformation est générée numériquement sous un chemin de chargement uniaxial. On ajoute à ce système la contrainte d'équilibre, en supposant que la contrainte totale dans le système est connue. Les déformations sont ensuite utilisées comme données d'observation dans un modèle sur-paramétré contenant un nombre plus élevé de branches viscoélastiques (pour l'instant, une seule branche supplémentaire est ajoutée).

L'identification est formulée comme une minimisation de la mCRE discrétisé, enrichie d'une régularisation de type Lasso sur les paramètres des branches comme montré par l'équation 2, de manière à favoriser une solution parcimonieuse.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{mCRE}}^2 = & \Delta t \sum_{n=0}^{N_t} \left[\sum_{k=1}^K \left(\frac{(Y_{k,n} - E_k(\varepsilon_n - X_{k,n}))^2}{2E_k} \right) + \frac{(\sigma_n - \sum_{k=1}^K Y_{k,n} - E_\infty \varepsilon_n)^2}{2E_\infty} \right] \\ & + \Delta t \sum_{n=0}^{N_t} \sum_{m=0}^n \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^K \frac{(Y_{k,m} - \eta_k \dot{X}_{k,m})^2}{\eta_k} + \alpha \Delta t \sum_{n=0}^{N_t} (\varepsilon_n - \varepsilon_{\text{obs},n})^2 + \lambda \sum_{k=1}^K (|E_k| + |\eta_k| + |E_\infty|) \end{aligned} \quad (2)$$

où $n \in \{0, \dots, N_t\}$ désigne l'indice de temps, $m \in \{0, \dots, n\}$ l'indice des pas de temps passés, $k \in \{1, \dots, K\}$ l'indice de branche du modèle rhéologique, et λ un paramètre de régularisation contrôlant le niveau de parcimonie.

5.2 Conceptualisation de l'algorithme

Un algorithme dédié, présenté à la Fig. 2, est conçu pour la minimisation parcimonieuse de la mCRE. Il débute par l'initialisation des paramètres (E_i, η_i) et des champs admissibles (ε, X, Y) , suivie d'une étape de localisation de la mCRE qui évalue la contribution de chaque paramètre à l'erreur totale et fixe l'ordre d'optimisation. Les itérations successives combinent la recalibration des champs admissibles par une méthode de type Gauss–Seidel et une mise à jour des paramètres selon un schéma de Lasso proximal, nécessaire en raison du terme de régularisation L^1 non différentiable. Pour un paramètre scalaire E , la mise à jour proximale s'écrit

$$z = E^n - lr \frac{\partial \text{mCRE}}{\partial E}, \quad (3)$$

$$E^{n+1} = \text{sign}(z) \max(|z| - lr\lambda, 0), \quad (4)$$

ce qui réalise un seuillage doux favorisant la mise à zéro des branches faiblement contributrices. Un critère d'arrêt à fenêtre glissante est enfin appliqué séparément à chaque paramètre.

Algorithm 1: Minimisation de la mCRE avec régularisation de type Lasso pour un modèle de Maxwell à cinq branches

▷ *Initialisation*

$\xi(E_i, \eta_i), \epsilon, X, Y$

▷ *Localisation de la mCRE*

Contribution du paramètre à ϵ_{mCRE}^2 (exemple pour η_i) :

$$\epsilon_{\eta_i}^2 = \sum_{n=0}^{N_i-1} \sum_{m=0}^n \frac{1}{2} \frac{(\Delta t_n)^2}{\eta_i} \left(Y_{i,m} - \eta_i \frac{X_{i,m+1} - X_{i,m}}{\Delta t_n} \right)^2$$

▷ *Itérations*

while $\epsilon_{mCRE}^2 > \text{toler}$ **do**

▷ *Mise à jour des champs admissibles optimaux des paramètres courants*

$\{E_i, \eta_i\}$

Équations non linéaires nécessitant des itérations internes pour la stabilité

▷ *Descente de gradient :*

Mise à jour des paramètres par ordre décroissant de leur contribution :

d'abord $\max\{\epsilon_{E_i}^2 + \epsilon_{\eta_i}^2\}$:

mise à jour E_i

mise à jour η_i

▷ *Critère d'arrêt pour la convergence des paramètres :*

Basé sur la stabilité sur une fenêtre glissante

si $\sigma(\eta_i^{(n-w+1:n)}) < \epsilon \Rightarrow$ arrêt de la mise à jour de η_i

si $\sigma(E_i^{(n-w+1:n)}) < \epsilon \Rightarrow$ arrêt de la mise à jour de E_i

FIGURE 2 – Algorithme de minimisation de la mCRE avec régularisation Lasso pour un modèle de Maxwell généralisé à cinq branches.

5.3 Élimination d'une branche parasite et calibration d'une branche de référence

Les premiers tests indiquent que, pour un choix raisonnable du paramètre de pénalisation $\lambda = 10^{-8}$, les branches effectivement actives dans le modèle de référence sont correctement identifiées, tandis que les branches parasites voient leurs contributions fortement réduites.

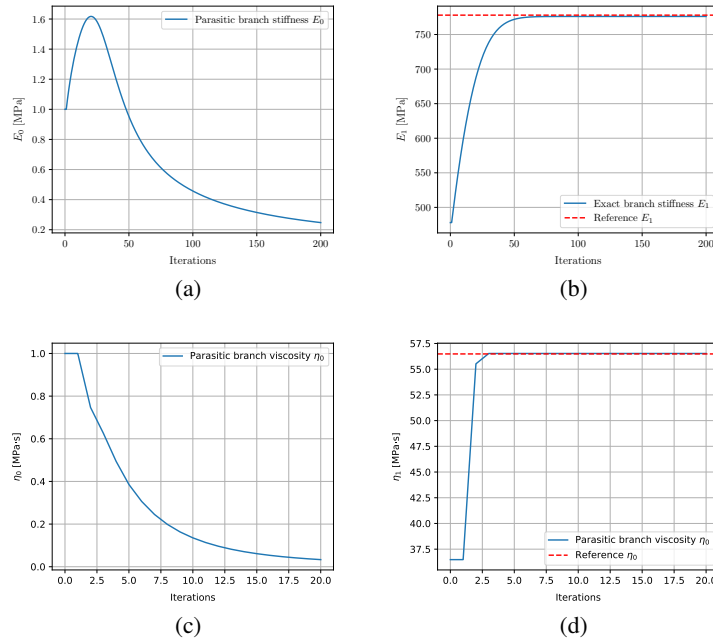


FIGURE 3 – Convergence des paramètres sous pénalisation Lasso simultanée : la branche parasite (E_0, η_0) est annulée, tandis que la branche de référence (E_1, η_1) converge vers ses valeurs de référence.

6 Conclusion

Ces premiers résultats, obtenus sur un cas unidimensionnel volontairement simple, montrent que la combinaison mCRE + régularisation Lasso permet de sélectionner automatiquement les branches effectivement actives, de recalibrer leurs paramètres et d'annuler les branches parasites, tout en restant compatible avec une description thermodynamique du matériau. Dans la suite, ce même cas de référence servira de banc d'essai pour augmenter fortement le nombre de variables internes initiales et explorer la capacité de la méthode à retrouver, parmi un ensemble sur-paramétré, un modèle de Maxwell généralisé parcimonieux. Une fois cette robustesse évaluée sur données synthétiques, la stratégie sera transposée à des données viscoélastiques réelles issues de mesures de champs, afin de tester sa pertinence en présence de bruit expérimental et de conditions de chargement complexes. Enfin, ces avancées fourniront un cadre de référence pour l'approche d'apprentissage proposée dans la suite, où des réseaux de neurones thermodynamiquement cohérents reprendront le rôle de sélection parcimonieuse et d'identification des lois de comportement.

7 Financement du projet

Ce projet a reçu un financement du European Research Council (ERC) dans le cadre du programme de recherche et d'innovation Horizon 2020 de l'Union européenne (convention de subvention n° 101002857).

Références

- [1] M. Rosenkranz, K. A. Kalina, J. Brummund, W. Sun, M. Kästner, Viscoelasticity with physics-augmented neural networks : Model formulation and training methods without prescribed internal variables, *Computational Mechanics*, 74(6), 1279–1301, 2024.
- [2] A. Benady, E. Baranger, L. Chamoin, NN-mCRE : A modified constitutive relation error framework for unsupervised learning of nonlinear state laws with physics-augmented neural networks, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 125(8), e7439, 2024.
- [3] E. Marino, M. Flaschel, S. Kumar, L. De Lorenzis, Automated identification of linear viscoelastic constitutive laws with EUCLID, *Mechanics of Materials*, 181, 104643, 2023.
- [4] B. Halphen, Q. S. Nguyen, Sur les matériaux standard généralisés, *Journal de Mécanique*, 14(1), 39–63, 1975.
- [5] H. Ziegler, *An Introduction to Thermomechanics*, Elsevier, 2012.
- [6] P. Ladevèze, A. Chouaki, Application of a posteriori error estimation for structural model updating, *Inverse Problems*, 15(1), 49, 1999.
- [7] J.-J. Moreau, On unilateral constraints, friction and plasticity, in *New Variational Techniques in Mathematical Physics*, 171–322, Springer, 1974.