

L'intelligence artificielle : vecteur de transformation des services à l'industrie nucléaire

05 et 06 février 2025
Cherbourg-en-Cotentin

IUT Grand Ouest Normandie
mercredi 9h00 à 19h00
jeudi 9h00 à 14h00

L'Intelligence Artificielle : accélérateur
d'innovation scientifique

Frédéric Jurie, Université de Caen Normandie



UNIVERSITÉ
CAEN
NORMANDIE

Introduction

IA Précoce (1980-2012)

La Révolution de l'Apprentissage Profond de Bout en Bout (2012-)

Réseaux Neuronaux Informés par la Physique (PINN) (2015-)

La Nouvelle Ère des Modèles de Fondation (2022-)

Conclusions

Introduction

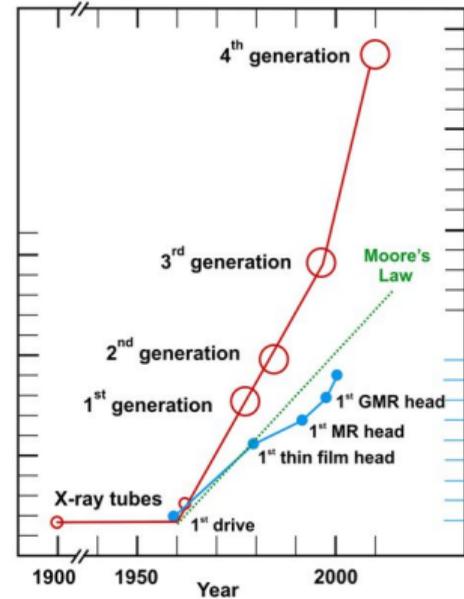
L'Impératif de l'Innovation dans l'Énergie Nucléaire

Des Défis Complexes Exigent de Nouvelles Approches

- ▶ Défis de plus en plus complexes en matière de sûreté, d'efficacité et de durabilité.
- ▶ Méthodes traditionnelles: peinent à suivre le rythme de ces exigences.
- ▶ Besoin d'une innovation plus rapide pour relever ces défis (nouvelles conceptions de réacteurs, optimisation du cycle du combustible gestion efficace des déchets).

Le Besoin Urgent de Progrès

- ▶ **Protocoles de Sécurité Améliorés** : Réduire les risques et renforcer les capacités d'intervention d'urgence.
- ▶ **Opérations Efficaces** : Optimiser les performances des centrales et réduire les coûts d'exploitation.
- ▶ **Solutions Durables** : Minimiser l'impact environnemental et traiter la gestion des déchets à long terme.



Des données qui progressent plus vite que la loi de Moore Borland (2017), Future Light Sources. In: AOF Synchrotron School

Opportunités de l'IA pour l'Industrie Nucléaire (Basé sur Carter et al. - Rapport du DOE) ¹

- ▶ **Simulations Accélérées** : Utiliser l'IA pour créer des “modèles de substitution” rapides et précis, remplaçant les simulations traditionnelles chronophages.
 - ▶ Exemple : Tester de nouveaux matériaux pour le gainage du combustible sans expériences physiques coûteuses ni longs temps de calcul.
- ▶ **Conception de Matériaux Avancée** : Employer l'IA pour la “conception inverse” afin d'identifier rapidement les matériaux ayant des propriétés spécifiques et un comportement optimal.
 - ▶ Exemple : Découvrir de nouveaux matériaux pour des composants de réacteur améliorés ou un meilleur confinement des déchets.
- ▶ **Logiciels Robustes et Sécurisés** : Développer l'IA pour créer des logiciels plus fiables et sécurisés pour les infrastructures nucléaires critiques.
 - ▶ Exemple : Réduire les temps d'arrêt et augmenter la sécurité grâce à des logiciels de surveillance robustes.

¹Carter, Jonathan et al. (2024) Advanced Research Directions on AI for Science, Energy, and Security Report on the U.S. Department of Energy (DOE)

Autres Opportunités de l'IA dans le Nucléaire (suite) ²

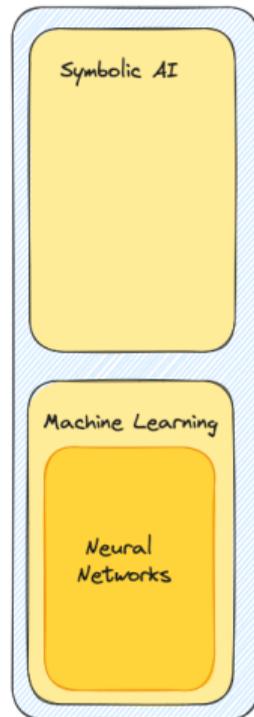
- ▶ **Expériences Révolutionnées** : Automatiser et optimiser les expériences avec l'IA pour accélérer le rythme de la recherche et du développement.
 - ▶ Exemple : Des laboratoires robotisés pour des tests à haut débit de nouveaux matériaux pour des applications nucléaires.
- ▶ **Contrôle de Systèmes Complexes** : Utiliser l'IA pour la conception, la prédiction et le contrôle de systèmes non linéaires et interactifs.
 - ▶ Exemple : Optimiser le réseau électrique en prédisant la charge des centrales nucléaires, ou en stabilisant le plasma de fusion.
- ▶ **Débloquer les Connaissances** : Tirer parti des “modèles de fondation” de l'IA pour intégrer les connaissances scientifiques existantes et accélérer la découverte.
 - ▶ Exemple : Un système d'IA qui agit comme un "super-scientifique" en identifiant des liens nouveaux et inattendus dans de grands ensembles de données scientifiques.

²Carter, Jonathan et al. (2024) Advanced Research Directions on AI for Science, Energy, and Security Report on the U.S. Department of Energy (DOE)

Qu'est-ce que l'IA ? - Concepts de Base

- ▶ **Un ensemble d'instructions** : L'IA utilise des algorithmes – comme des recettes précises – pour résoudre les problèmes étape par étape. Pensez à “trier les nombres de manière efficace”.
- ▶ **Révolutionne la résolution de problèmes scientifiques et industriels** : Nous pouvons résoudre des problèmes auparavant trop complexes.
- ▶ **Deux approches principales de l'IA** :
 - ▶ **IA Symbolique (Basée sur les Connaissances)** : Utilise des connaissances et des règles explicitement définies pour la résolution de problèmes.
 - ▶ **Avantages** : Résultats clairs, comportements prévisibles.
 - ▶ **Inconvénients** : Difficile d'encoder des tâches complexes avec des règles explicites.
 - ▶ **IA Axée sur les Données (Apprentissage Automatique)** : Apprend des modèles à partir des données.
 - ▶ **Avantages** : Pas besoin de programmer manuellement des règles, peut détecter des modèles non évidents.
 - ▶ **Inconvénients** : Nécessite de grands ensembles de données, peut être opaque, exige de la prudence.

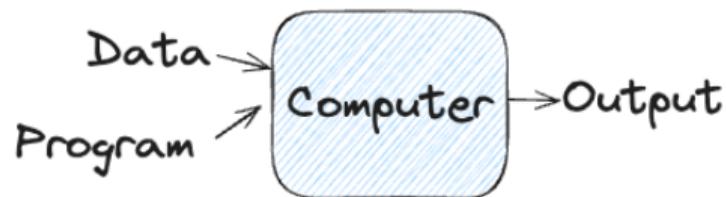
Artificial intelligence



IA, ML, DL

L'Apprentissage Automatique : Une Approche Différente de la Programmation

Traditional Programming



Machine Learning



La programmation traditionnelle exige un modèle explicite et des données complètes pour traiter de nouvelles entrées, tandis que l'apprentissage automatique prend des données en entrée et en *apprend* un programme, ce qui lui permet de traiter de nouvelles données. Cela est utile pour les problèmes complexes qui sont difficiles à modéliser.

Comment l'Apprentissage Automatique Apprend : Les Bases

Apprentissage Supervisé : Apprendre à partir d'Exemples

- ▶ **Objectif** : Apprendre le lien entre les entrées et les sorties. Semblable au suivi d'une recette : des ingrédients (entrées) produisent un plat (sortie).
- ▶ **Processus** : Nous fournissons à l'IA de nombreux exemples d'entrées et de leurs sorties correctes, qu'elle utilise pour apprendre une fonction, écrite sous la forme : $y = f_w(x)$.
- ▶ **Défis Liés aux Données** : Les données du monde réel sont souvent désordonnées, avec du bruit et des incertitudes. Nous en tenons compte dans la façon dont l'IA relie les entrées aux sorties.
- ▶ **Mesure de la Performance** : Nous utilisons une fonction de perte (ℓ) pour mesurer l'écart entre la prédiction de l'IA et la sortie correcte.

Risque vs. Risque Empirique

- ▶ **L'Idéal (Risque)** : Nous voulons que l'IA soit parfaite dans *tous* les cas possibles – c'est le *Risque*. Mais il est impossible de le calculer.
- ▶ **Le Pratique (Risque Empirique)** : Nous mesurons dans quelle mesure l'IA fonctionne bien sur les données dont nous disposons – le *Risque Empirique*.
 - ▶ Cela donne une indication (parfois peu) fiable du niveau d'apprentissage de l'IA.

Formules Clés :

- ▶ **Risque** : $\mathcal{R}(f_w) = \mathbb{E}[\ell(f_w(x), y)]$ (erreur moyenne).
- ▶ **Risque Empirique** : $\hat{\mathcal{R}}(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ell(f_w(x_i), y_i)$ (erreur moyenne sur les données d'entraînement).

Entraîner le Modèle d'IA : Descente de Gradient

Minimiser les Erreurs

- ▶ **L'Objectif** : Pour enseigner à l'IA, nous devons minimiser les erreurs dans la prédiction de la fonction.
- ▶ **Le Processus** : Nous ajustons de manière répétée les paramètres de l'IA pour rapprocher ses prédictions des valeurs correctes en fonction de l'ensemble de données d'entraînement.
- ▶ **Trouver les Paramètres Optimaux** : Ajuster les paramètres du modèle (w) jusqu'à ce que ses prédictions soient aussi proches que possible des sorties souhaitées.

Formule Clé :

- ▶ Trouver w tel que $\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial w} = 0$

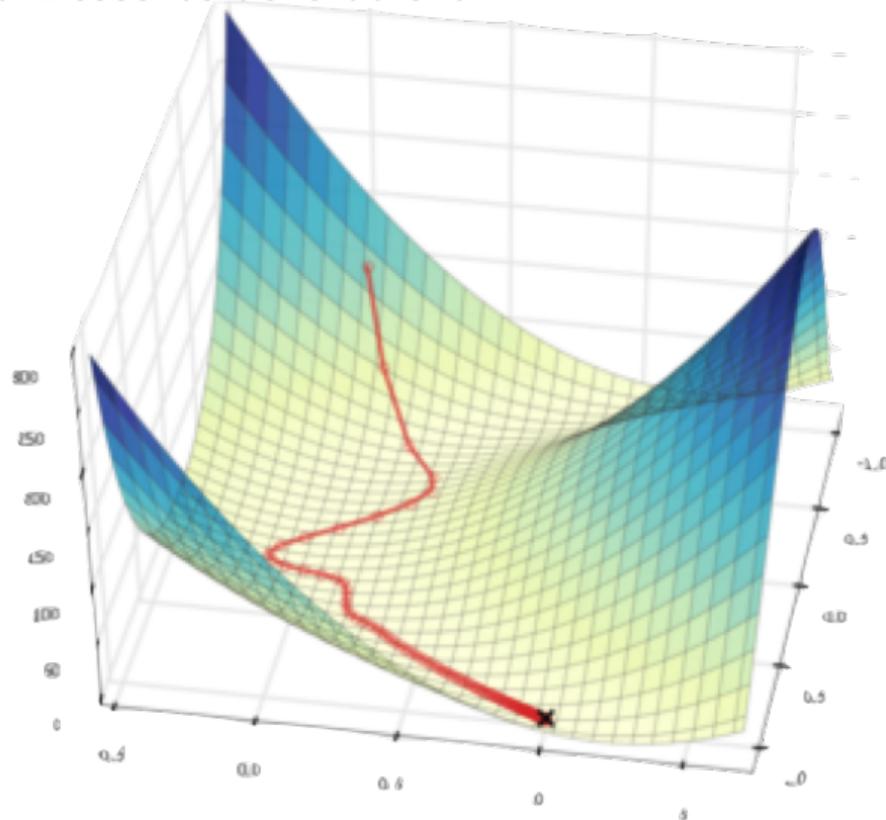
Descente de Gradient : L'Algorithme d'Optimisation

- ▶ **Analogie** : Imaginez que vous descendez une montagne pour trouver le point le plus bas ; le gradient indique le chemin le plus raide vers le bas.
- ▶ **Comment** : Nous utilisons le gradient pour ajuster itérativement les paramètres du modèle dans le sens de la diminution de l'erreur.
- ▶ **Taux d'Apprentissage** : Contrôle la taille de l'étape pour les ajustements de paramètres.

Formule Clé :

$$w_n = w_{n-1} - \eta \frac{\partial \mathcal{R}(w_{n-1})}{\partial w}$$

Visualisation de la Descente de Gradient



La descente de gradient cherche le point le plus bas de la surface d'erreur, en ajustant itérativement les paramètres pour minimiser la fonction de perte.

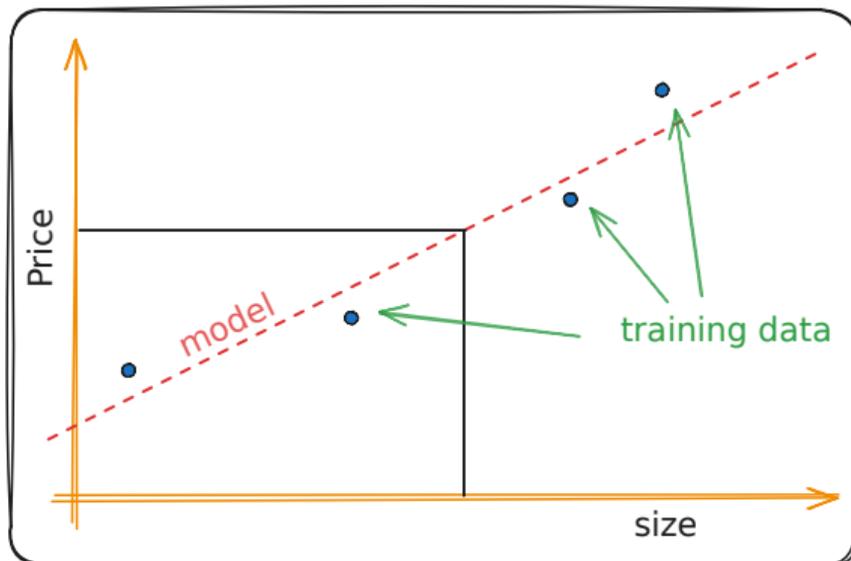
Réseaux Neuronaux : Le Cœur des Modèles d'IA

- ▶ **Structure en Couches** : Les réseaux neuronaux ont des couches, chacune effectuant un calcul spécifique, transmettant l'information à la suivante.
 - ▶ **Couche d'Entrée** : Là où les données entrent.
 - ▶ **Couches Cachées** : Là où le modèle apprend des caractéristiques complexes.
 - ▶ **Couche de Sortie** : Produit la prédiction.
- ▶ **Fonctions d'Activation** : Introduisent une non-linéarité pour permettre l'apprentissage de problèmes plus complexes.
- ▶ **Poids et Biais** : Paramètres appris pendant l'entraînement, qui définissent la force avec laquelle chaque entrée influence la sortie.
- ▶ **Idée Fondamentale** : Les réseaux neuronaux sont de puissants estimateurs de relations complexes, et c'est ainsi que l'IA apprend à produire des prédictions utiles.

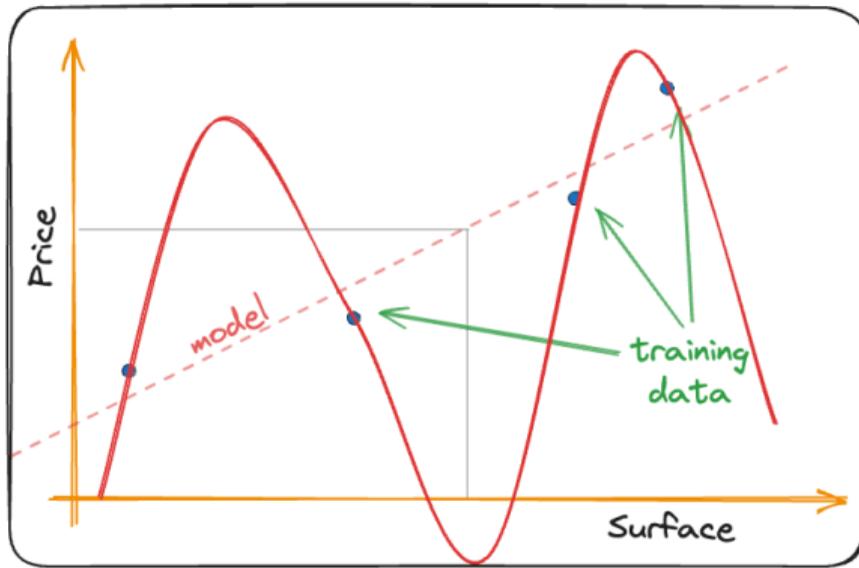
Formule Simplifiée d'un Réseau Neuronal:

- ▶ $\mathbf{a}^{(l)} = \sigma(\mathbf{W}^{(l)}\mathbf{a}^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)})$. Où $\mathbf{a}^{(l)}$ est la sortie de la couche l , et σ est une fonction d'activation.

Exemple Illustratif



$$P = 423 \times S + 40813$$



 100 parameter model

Des modèles trop complexes peuvent conduire à des erreurs de généralisation également appelées hallucinations

IA Précoce (1980-2012)

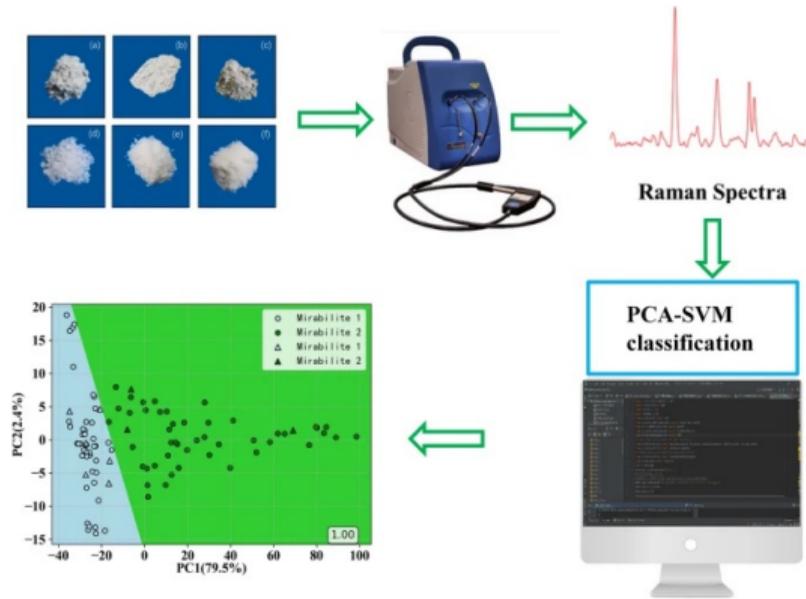
IA Précoce : Ingénierie des Caractéristiques

- ▶ **Le Problème** : Transformer des données brutes en une forme que les premiers modèles d'apprentissage automatique pouvaient utiliser.
- ▶ **La Solution** : Extraire manuellement des “caractéristiques” – créer des ingrédients pour la recette.
- ▶ **La Dépendance aux Experts** : Des experts du domaine (scientifiques, ingénieurs) ayant une compréhension approfondie étaient nécessaires pour sélectionner manuellement des caractéristiques appropriées.
- ▶ **Le Processus** :
 1. **Données Brutes** : Saisir les données issues d'expériences, de capteurs, etc.
 2. **Extraction des Caractéristiques** : Les experts choisissent manuellement les traits les plus importants.
 3. **Apprentissage Automatique** : Les caractéristiques sélectionnées sont utilisées comme entrées dans le modèle.

Analogie : Reconnaissance de voitures dans des image : l'IA précoce s'appuyait sur des caractéristiques programmées manuellement comme “a des roues”, “a une forme rectangulaire”.

Exemple : Spectroscopie pour l'Analyse des Matériaux

- ▶ **Le Problème** : Utilisation de données spectroscopiques (Raman, diffraction des rayons X) pour l'identification des matériaux, l'analyse de la composition, etc.
- ▶ **L'Approche Traditionnelle** :
 - ▶ **Données Brutes** : Graphique spectroscopique.
 - ▶ **Analyse par des Experts** : Les spécialistes des matériaux examinaient manuellement les propriétés spécifiques des graphiques :
 - ▶ Positions des Pics
 - ▶ Intensités des Pics
 - ▶ Largeurs des Pics
 - ▶ **Apprentissage Automatique** : Les caractéristiques extraites manuellement seraient l'entrée d'un modèle de classification.
- ▶ **Avantage** : Identification plus rapide des matériaux et caractérisation des compositions chimiques.



La spectroscopie Raman peut être utilisée pour classer et identifier rapidement des médicaments minéraux. Dans cet article, un modèle de classification et d'identification visuelle de la spectroscopie Raman combinée aux algorithmes PCA et SVM a été développé pour classer et identifier rapidement les médicaments minéraux carbonatés et sulfurés.³

³Han et al. (2023) Study on the classification and identification of various carbonate and sulfate mineral medicines based on Raman spectroscopy combined with PCA-SVM algorithm. ANAL. SCI. 39, 241–248.

Les Limites de l'Ingénierie Manuelle des Caractéristiques

- ▶ **Dépendance aux Experts** : Nécessite des connaissances spécialisées du domaine.
- ▶ **Prend du Temps** : Processus fastidieux et difficile, qui peut prendre des années à optimiser.
- ▶ **Portée Limitée** : Pourrait passer à côté de modèles subtils.
- ▶ **Manque de Généralisation** : Les caractéristiques peuvent être spécifiques à un problème donné.
- ▶ **Non Évolutif** : Difficile à adapter à des ensembles de données volumineux et complexes.

Transition : Ces limitations ont conduit au développement de méthodes d'apprentissage profond "de bout en bout", qui automatisent le processus d'extraction des caractéristiques.

La Révolution de l'Apprentissage Profond de Bout en Bout (2012–)

Apprentissage Profond de Bout en Bout : Automatiser l'Extraction des Caractéristiques

- ▶ **Le Changement** : Les modèles d'apprentissage profond apprennent les caractéristiques directement à partir des données brutes.
- ▶ **Apprentissage Automatisé des Caractéristiques** : Les modèles apprennent des représentations hiérarchiques des données, en extrayant automatiquement les traits pertinents.
- ▶ **Entrée Brute à Sortie** : Les modèles sont entraînés directement sur les entrées brutes et leurs sorties attendues.
- ▶ **Pas de Sélection Manuelle des Caractéristiques** : Les modèles eux-mêmes apprennent ce qui est le plus pertinent pour une tâche donnée.

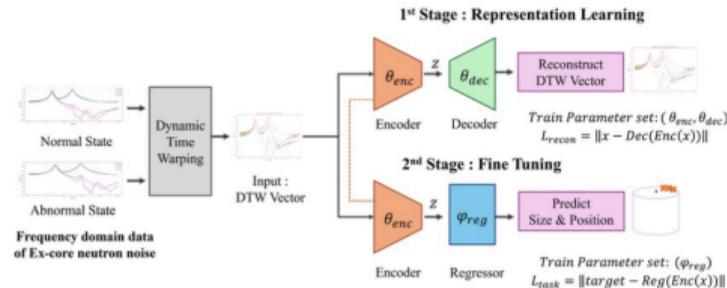
Analogie : Comme l'apprentissage de la conduite par l'expérience, sans qu'on vous parle des caractéristiques spécifiques de la route, le modèle apprend par l'exemple.

Apprentissage Profond de Bout en Bout pour la Surveillance des Réacteurs Nucléaires

- ▶ **Défi** : Prédiction en temps réel des états du réacteur et détection des anomalies.
- ▶ **Approche de Bout en Bout** :
 - ▶ **Données Brutes** : Relevés bruts des capteurs (température, pression, flux de neutrons, etc.).
 - ▶ **Apprentissage Automatisé** : Le modèle d'apprentissage profond apprend à partir des données pour prédire les états du réacteur et identifier les événements inhabituels.
 - ▶ **Sortie** : Le modèle produit des prédictions, ou une alarme pour indiquer une anomalie.
- ▶ **Pas de Sélection Manuelle des Caractéristiques** : Supprime le besoin d'expertise manuelle pour la sélection des paramètres.
- ▶ **Avantages** : Temps de réponse plus rapide, sensibilité potentiellement plus élevée aux anomalies subtiles qui pourraient être manquées par une analyse manuelle.

Diagnostic de la Dégradation de la Force de Serrage dans les Réacteurs Nucléaires⁴

- ▶ La dégradation de la force de serrage dans les cuves de support du cœur peut avoir un impact sur la sûreté et la fiabilité des centrales nucléaires.
- ▶ Combiner des techniques d'apprentissage profond et des algorithmes de déformation temporelle dynamique (DTW).
- ▶ L'approche proposée peut prédire avec précision la taille et la position de la dégradation de la force de serrage.



⁴Jeong et al. ,(2024) Deep-Learning and Dynamic Time Warping-Based Approaches for the Diagnosis of Reactor Systems. Sensors 2024, 24, 7865

**Réseaux Neuronaux Informés par la Physique (PINN)
(2015–)**

Intégrer la Physique à l'IA : Le Besoin de PINN

- ▶ **Limites des Données Seules** : Les modèles d'IA qui n'utilisent que les données peuvent “surapprendre”, en apprenant le bruit et en faisant des prédictions inexactes en dehors des données d'entraînement.
- ▶ **La Physique comme Force Directrice** : Les PINN utilisent les lois de la physique pour guider l'apprentissage, garantissant ainsi la robustesse et la précision physique.
- ▶ **Robustesse** : En utilisant des connaissances physiques préalables, le modèle peut extrapoler plus précisément en dehors de la région d'entraînement.
- ▶ **Efficacité des Données** : Les connaissances supplémentaires données au modèle par les lois de la physique aident à réduire la quantité de données nécessaires à l'entraînement.
- ▶ **Cohérence** : Les modèles doivent être cohérents avec les données *et* avec les lois physiques connues.

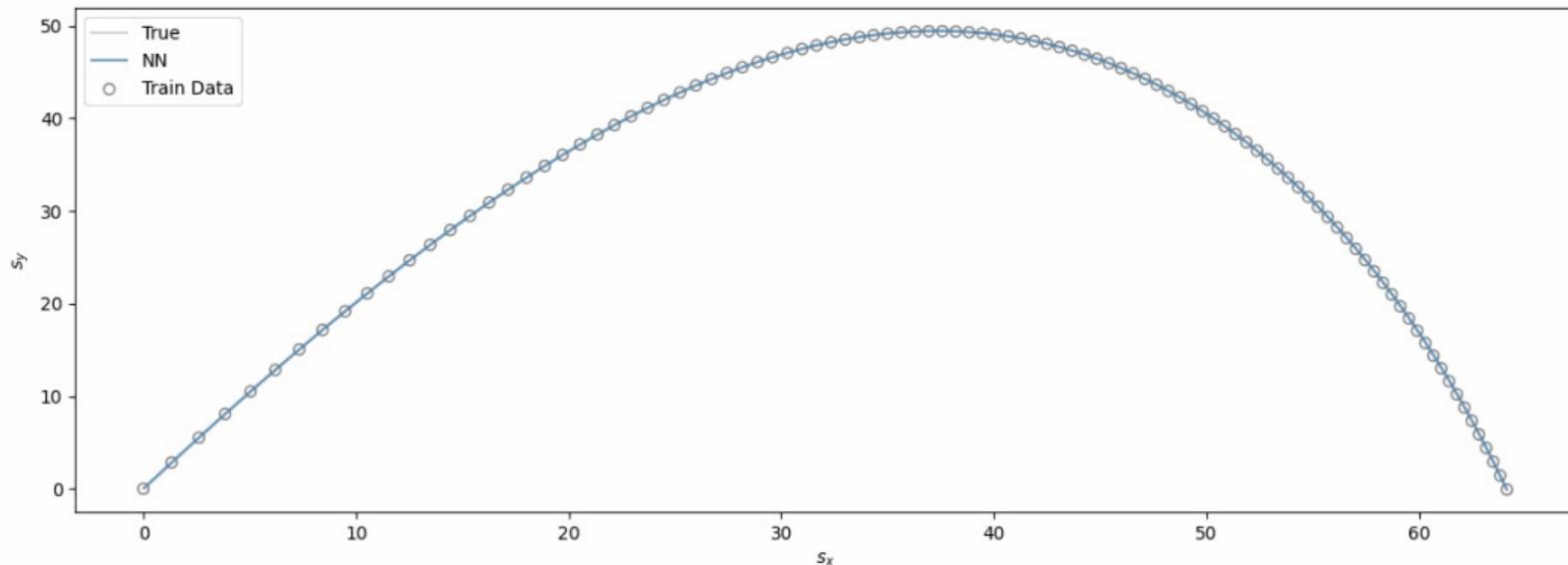
Avantage : Les PINN sont capables d'apprendre avec des données limitées et d'extrapoler avec précision.

Exemple : Mouvement d'un Projectile

- ▶ **Scénario** : Suivre le mouvement d'une balle après son lancement (un projectile), un problème physique de base.
- ▶ **Le Défi** : Mesures limitées et bruitées de la position de l'objet.
- ▶ **Connaissance de la Physique** : Nous savons que la trajectoire de l'objet est régie par la gravité et la résistance de l'air.
- ▶ **Solution des PINN** : Combiner les données avec la physique pour obtenir une prédiction précise du mouvement de l'objet.
- ▶ **L'Objectif** : Apprendre la trajectoire de l'objet en utilisant à la fois les données *et* les principes physiques.

PINN : Apprendre à partir des Données ET de la Physique

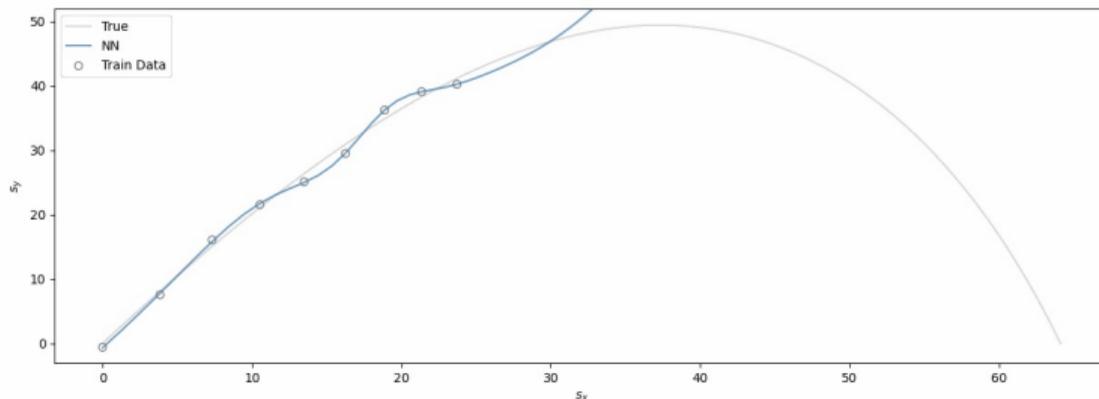
Apprentissage supervisé standard, utilisant des données parfaites dans tout le domaine d'intérêt



Images de : <https://towardsdatascience.com/physics-informed-neural-networks-pinns-an-intuitive-guide-fff138069563>

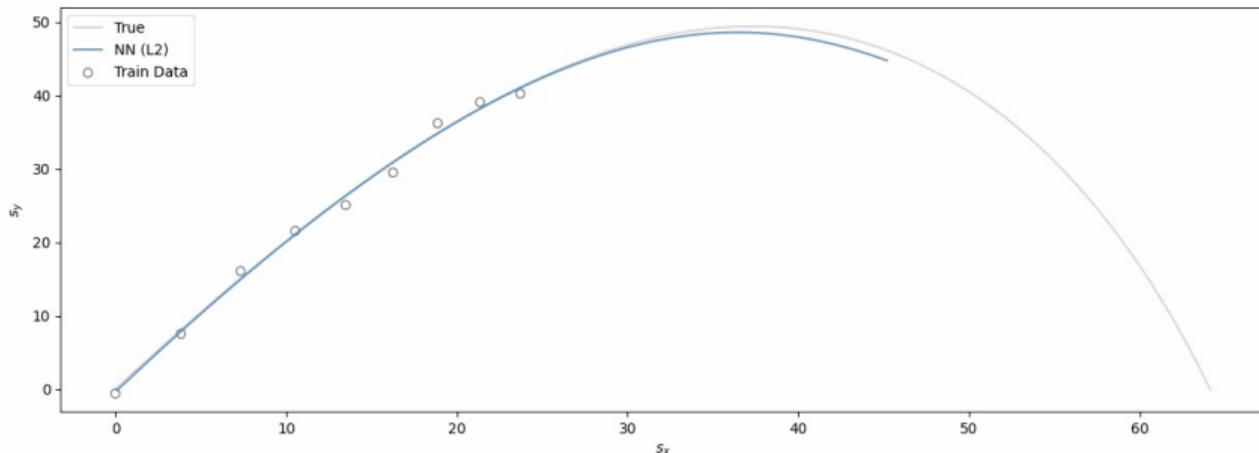
IA Axée sur les Données : Le Problème du Surapprentissage

- ▶ **Données du Monde Réel** : Les données sont bruitées, clairsemées et incomplètes.
- ▶ **Données Imparfaites** : Un modèle entraîné uniquement sur ces données pourrait ne pas réussir à extrapoler.
- ▶ **Surapprentissage** : Le modèle apprend le bruit dans les données, et non le principe sous-jacent.
- ▶ **Résultat** : Il n'est pas possible de prévoir ce qui se passe en dehors des endroits où les données ont été fournies.



Régularisation : Une Solution Simple, Mais Toujours Limitée

- ▶ **Régularisation L2** : Un moyen d'améliorer la robustesse du modèle en réduisant le surapprentissage.
- ▶ **Est-ce que cela fonctionne ?** Cela peut aider, mais ce n'est toujours pas suffisant pour utiliser une prédiction basée sur la physique.
- ▶ **Toujours Pas Basée sur la Physique** : Elle ne force pas le modèle à obéir aux lois de la physique.
- ▶ Un modèle entraîné avec la régularisation L2 fonctionne mieux là où les données existent, mais ne peut toujours pas se généraliser correctement.



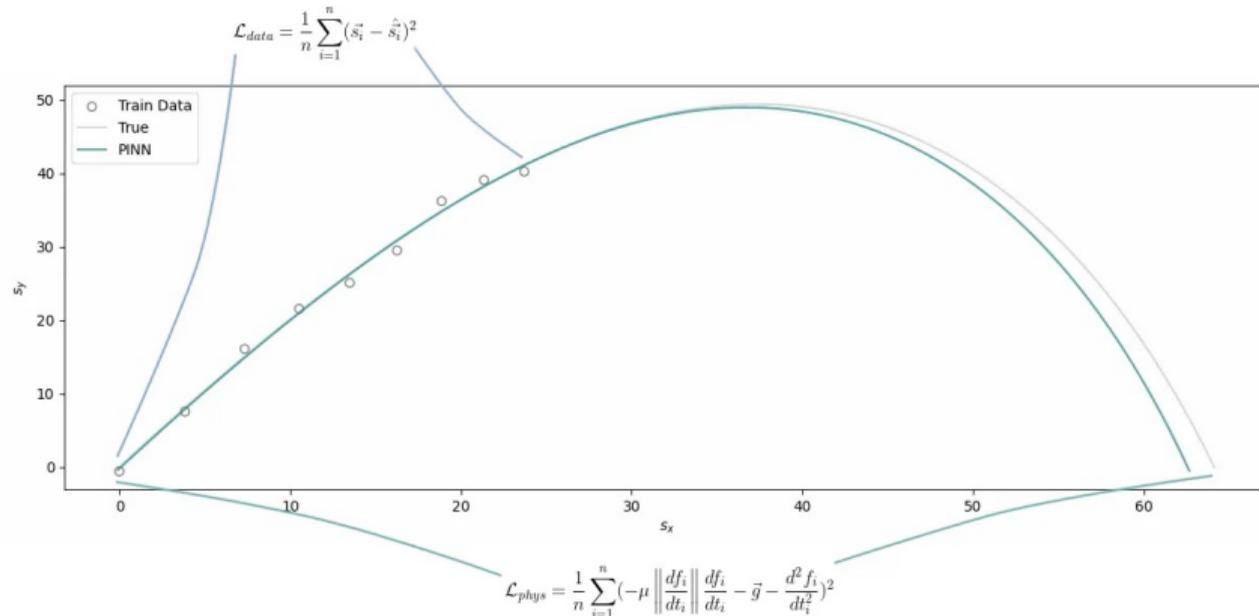
Comment les PINN Combient Données et Physique

- ▶ **Adapter les Données** : Le modèle utilise les données d'entraînement pour s'adapter, comme dans le cas de bout en bout.
- ▶ **Obéir aux Lois Physiques** : Le modèle doit également être cohérent avec la physique pendant l'entraînement.
- ▶ **Perte Physique** : Terme de la fonction de perte supplémentaire qui oblige le modèle à se conformer aux lois physiques.
- ▶ **Résultat** : En combinant les données et la physique de cette manière, le modèle peut extrapoler avec précision en dehors de la région d'entraînement.

Analogie : C'est comme une recette de gâteau (données) et une liste de contrôle des principes de la pâtisserie (physique), ce qui améliore beaucoup le gâteau qui en résulte.

Les PINN en Action : Combiner Données et Physique

- ▶ **Le Résultat** : Le modèle PINN est capable de s'adapter aux données tout en respectant les lois physiques du mouvement des projectiles.
- ▶ **Plus Complet** : Il en résulte un modèle plus robuste et complet, capable de fonctionner correctement sur l'ensemble du domaine.



La Puissance des PINN pour la Science

- ▶ **Apprendre avec des Données Limitées** : Les PINN utilisent la physique pour extraire des informations même avec des données clairsemées.
- ▶ **Meilleures Prédictions** : Permet d'obtenir des modèles plus fiables et précis, avec des capacités de généralisation accrues.
- ▶ **Découverte** : Aide à découvrir de nouvelles lois et de nouveaux modèles en comprenant l'interaction entre les données et la physique.
- ▶ **Large Éventail d'Applications** : Notamment dans la science des matériaux, la dynamique des fluides, la modélisation du climat, etc.

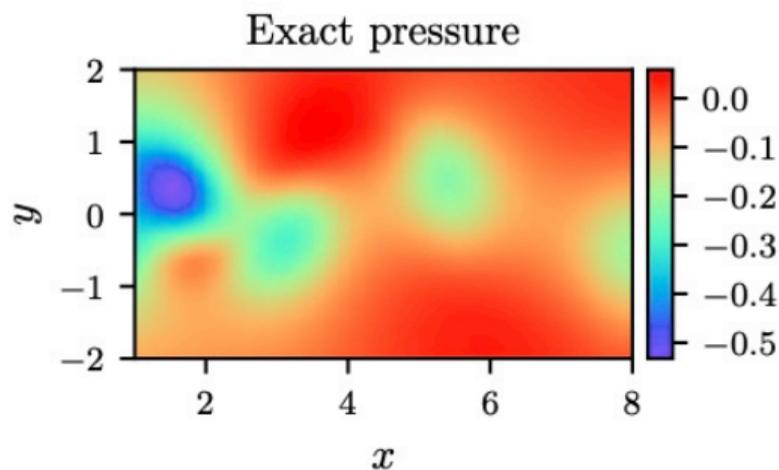
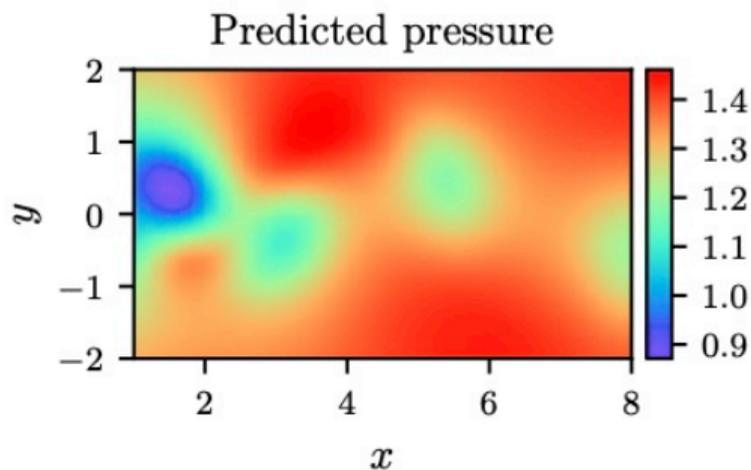
Point Clé à Retenir : Les PINN sont un pont entre l'IA axée sur les données et la physique, offrant une approche robuste et scientifiquement éclairée des problèmes complexes.

Les PINN en Action : Modélisation de la Dynamique des Fluides

- ▶ **Défi** : Prédire l'écoulement des fluides (air, eau, plasma) à l'aide de simulations numériques classiques est coûteux en termes de calcul.
- ▶ **Approche des PINN** :
 - ▶ **Connaissance de la Physique** : La dynamique des fluides est décrite par les équations de Navier-Stokes (EDP).
 - ▶ **Données** : Données expérimentales ou de simulation limitées.
 - ▶ **Formation PINN** : Le modèle est entraîné en utilisant à la fois les données et les équations de Navier-Stokes.
 - ▶ **Résultat** : Le PINN estime avec précision l'écoulement du fluide tout en respectant les lois physiques fondamentales.
- ▶ **Avantage** : Prédiction beaucoup plus rapide que les simulations traditionnelles, même avec des données limitées.

Applications nucléaires : Exemple : modélisation de l'écoulement du fluide de refroidissement dans un réacteur ou de l'écoulement du plasma dans un dispositif de fusion.

Réseaux neuronaux informés par la physique : Un cadre d'apprentissage profond pour résoudre les problèmes directs et inverses impliquant des équations aux dérivées partielles non linéaires M Raissi, P Perdikaris, GE Karniadakis - Journal of Computational physics, 2019



Grâce aux PINN, il est possible de prévoir la pression des fluides avec une grande précision

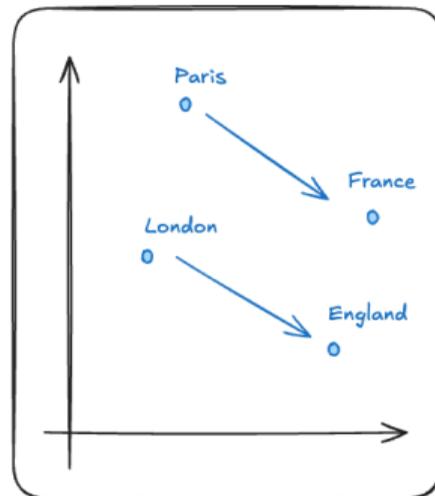
La Nouvelle Ère des Modèles de Fondation (2022-)

Modèles de fondation : Un Nouveau Paradigme pour l'IA

- ▶ **S'appuyer sur les Méthodes Passées** : Nous avons discuté de la façon dont les données et la physique peuvent informer les modèles d'IA.
- ▶ **Nouveau Défi** : Pouvons-nous créer un modèle d'IA qui utilise tous les types d'informations, y compris les connaissances scientifiques, les expériences et le texte ?
- ▶ **Modèles de fondation** : Formés sur d'énormes ensembles de données, ces modèles exécutent une variété de tâches.
- ▶ **Représentation Holistique** : Les modèles de fondation intègrent des informations provenant de multiples sources pour créer une représentation unifiée du monde.

Intégrations Sémantiques : Comment l'IA 'Comprend' le Sens

- ▶ **Imaginez** : Transformer des mots, des images et des données scientifiques en un langage commun que l'IA peut comprendre.
- ▶ **Intégrations Sémantiques** : Représentations numériques qui capturent le sens de chaque information.
- ▶ **Concept Clé** : Les idées similaires sont situées à proximité les unes des autres dans un "espace d'intégration".
- ▶ **Exemple** : "Paris" et "Londres" sont positionnées plus proches que "Paris" et "pays".



Symboles	Représentation vectorielle
'capitale'	(0.3,-1.2,4.3,7.8)
'paris'	(0.4,3.4,4.9,3.8)
'londres'	(3.3,-1.2,4.3,7.8)
'pays'	(9.1,15.2,8.3,3.8)

Modèles Autorégressifs : Prédire l'Avenir à Partir du Passé

- ▶ **Le Concept** : Les modèles prédisent une valeur à partir de ses propres valeurs passées.
- ▶ **Régression "Auto"** : Le terme "auto" fait référence au modèle utilisant les données passées de la *même* variable pour prédire le point suivant.
- ▶ **Données Séquentielles** : Conviennent aux séries chronologiques (par exemple, les cours boursiers, les données météorologiques), au texte (prédire le mot suivant), aux données audio ou vidéo.
- ▶ **Prédiction** : Le modèle regarde un certain nombre d'étapes passées pour effectuer la prédiction.
- ▶ **Aucune Entrée Externe** : Seules les données passées sont utilisées pour la prédiction.

Analogie : Imaginez prédire le temps en vous basant uniquement sur les mesures de température des derniers jours.

Text : "A robot must obey orders given to it by human beings except where such orders would conflict with the First Law.



Generated training examples

Examples #	Inputs	Correct output (ground truth)
#1	A robot must obey orders given	to
#2	robot must obey orders given to	it
#3	must obey orders given to it	by
#4	obey orders given to it by	human
#5	orders given to it by human	beings

La Représentation Émerge de la Combinaison des Données

- ▶ **La Puissance de l'Intégration** : La combinaison de sources de données donne au modèle des informations plus riches.
- ▶ **Découvertes Inattendues** : En combinant des articles scientifiques, des données expérimentales, des manuels, etc., le modèle peut découvrir de nouveaux liens.
- ▶ **Capacités Émergentes** : La modélisation et les comportements complexes émergent de l'intégration des données.
- ▶ **L'Avantage** : L'IA peut détecter des liens qu'il est difficile pour les humains de voir.

Data

Text



Images

Speech



Structured
Data

3D Signals



Training

Foundation
Model

Adaptation

Tasks

Question
Answering



Sentiment
Analysis



Information
Extraction



Image
Captioning



Object
Recognition



Instruction
Following

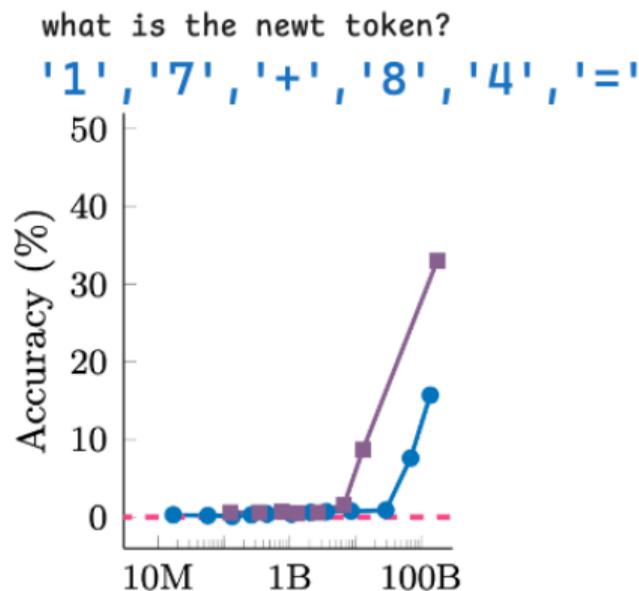


Modèles de fondation : Un Nouveau Paradigme pour l'IA

- ▶ **Transformateur** : Il ne s'agit pas d'un simple outil de plus, mais d'un changement fondamental dans la façon dont nous utilisons l'IA.
- ▶ **Large Intégration** : Les modèles peuvent intégrer de nombreux types de données, du texte et des images aux données scientifiques et aux simulations.
- ▶ **Échelle Sans Précédent** : Ces modèles ont une taille et une complexité très importantes.
- ▶ **Adaptabilité** : Les modèles peuvent être utilisés pour diverses applications.

Capacités Inattendues des Modèles de fondation

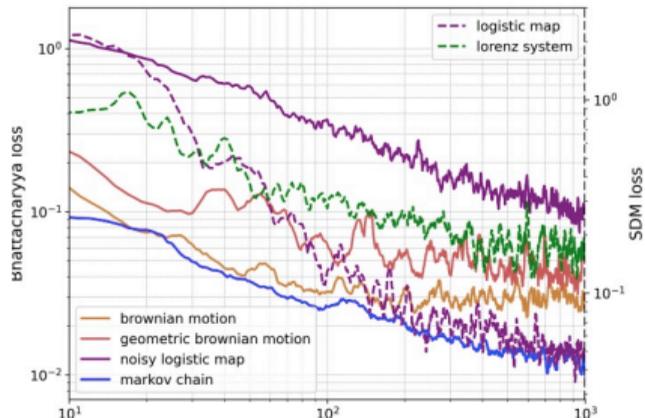
- ▶ **Au-delà de la Mémorisation** : Les modèles de fondation ne se contentent pas de mémoriser les données d'entraînement. Ils apprennent en fait à les modéliser.
- ▶ **Comportement Émergent** : Des capacités complexes sont observées lors de la combinaison de différentes sources de données.
- ▶ **Exemple** : Les modèles entraînés au texte peuvent effectuer des analyses de séries temporelles
- ▶ **Le Potentiel** : Ces nouvelles capacités vont changer considérablement les flux de travail scientifiques.



Capacités émergentes des grands modèles linguistiques (Wei et al. (2022) Emergent Abilities of Large Language Models. Trans. Mach. Learn. Res.)

Les Modèles de fondation comme Prévissionnistes de Séries Chronologiques

- ▶ **Résultat Surprenant** : Les grands modèles linguistiques, initialement entraînés sur du texte, peuvent être adaptés à la prévision de séries chronologiques.
- ▶ **Aucune Connaissance Spécifique des Séries Chronologiques** : Le modèle a été entraîné pour prédire des mots, mais peut également prédire le point suivant d'une série chronologique.
- ▶ **Précision** : Ils peuvent prédire les tendances futures dans les mesures scientifiques avec une bonne précision.



- ▶ Gruver et al.. 2023. Large language models are zero-shot time series forecasters. In: NeurIPS
- ▶ Jin et al. 2023. Time-llm: Time series forecasting by reprogramming large language models. In: ICLR

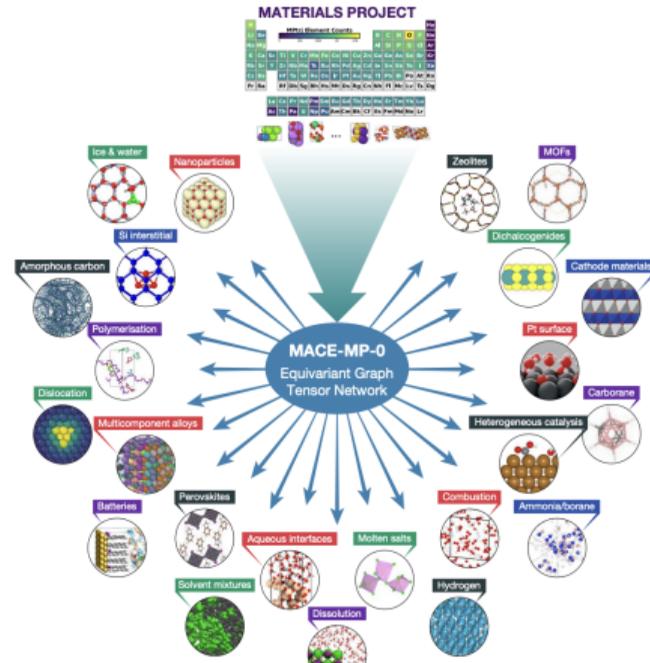
Défis Clés pour les Modèles de fondation

- ▶ **Un Domaine en Développement** : Il s'agit d'un domaine de recherche en développement, qui nécessite encore beaucoup de travail.
- ▶ **Données d'Entraînement** : Quelles données doivent être utilisées pour entraîner ces modèles ? Comment assurer la qualité des données ?
- ▶ **Ajustement Fin** : Comment adapter ces modèles massifs à nos applications scientifiques spécifiques ?
- ▶ **Robustesse et Biais** : Comment s'assurer que ces modèles n'apprennent pas des corrélations fallacieuses et qu'ils sont justes ?

Important à savoir : Ces défis sont explorés par des chercheurs dans le monde entier.

Un Modèle de fondation pour la Chimie des Matériaux Atomistiques⁵

- ▶ **Ce qu'il Fait** : Un modèle capable de modéliser les propriétés des matériaux au niveau atomique.
- ▶ **Applications** : Il peut être utilisé pour explorer de nouveaux matériaux pour diverses applications, des meilleures barres de combustible au stockage des déchets nucléaires.

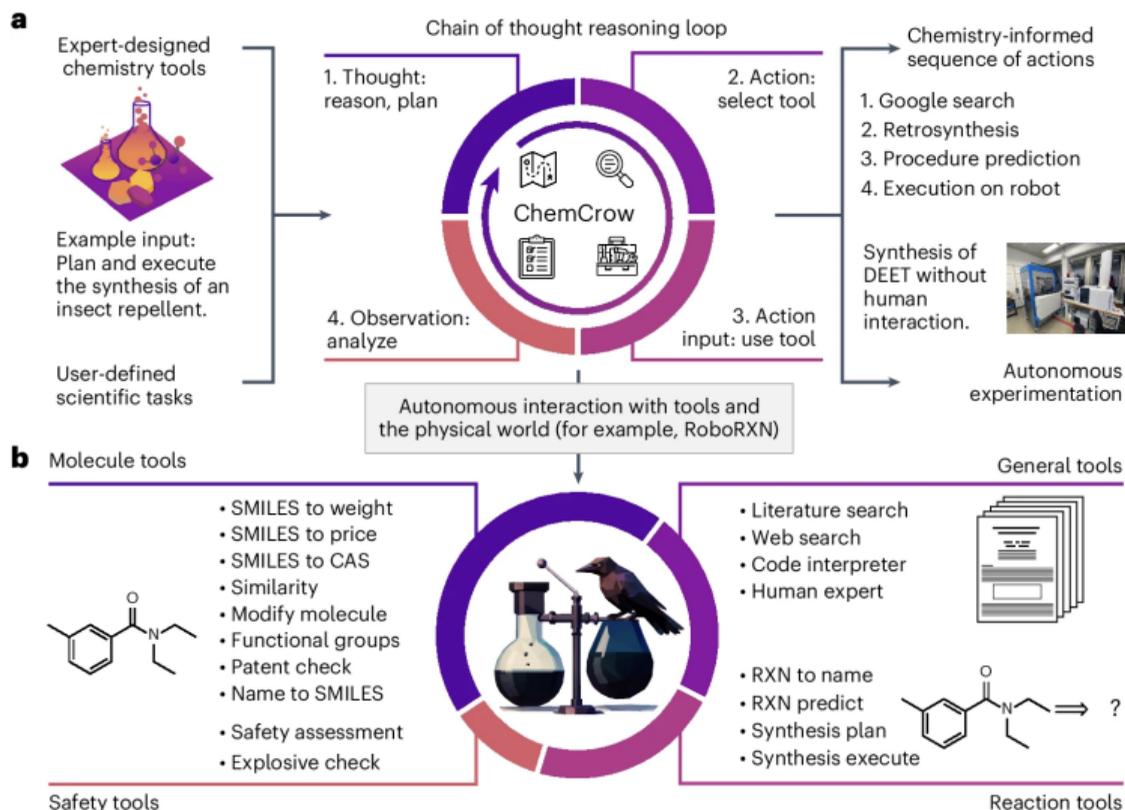


Modèle de Matériaux Atomistiques

⁵A foundation model for atomistic materials chemistry, Batatia et al., 2024

Un Modèle de fondation pour la Chimie ⁶

- ▶ **Ce qu'il Fait :** Un modèle capable de réaliser des expériences chimiques en utilisant des outils de chimie.
- ▶ **Capacités de Raisonnement :** Il a la capacité d'effectuer des tâches de chimie, en intégrant les principes de la chimie.



En utilisant des outils de chimie, l'IA peut réaliser des expériences complexes, en intégrant les principes de la chimie.

⁶M. Bran, A., Cox, S., Schilter, O. et al. Augmenting large language models with chemistry tools.

AuroraGPT : Un Modèle de fondation pour la Science Ouverte ⁷

- ▶ **Un Assistant Scientifique** : Un modèle créé par le Laboratoire National d'Argonne qui agit comme un assistant scientifique.
- ▶ **Multilingue et Multimodal** : C'est un modèle très large, qui peut traiter de nombreuses langues et de nombreux types de données.
- ▶ **Construit avec un Superordinateur Exascale** : Le modèle nécessite beaucoup de puissance de calcul.

⁷<https://www.anl.gov/event/argonnes-auroragpt-project>



Open Science Foundation Model

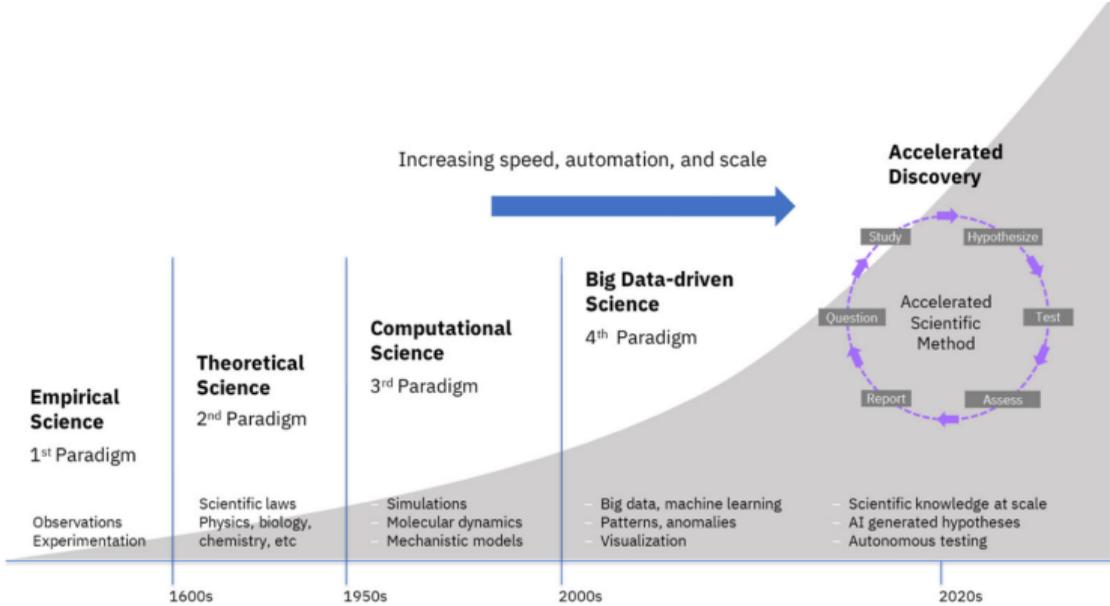
Tuned and Adapted Downstream Models

Exemplar science tasks

- Scientific Discovery
- Digital Twins
- Inverse Design
- Code Optimization
- Accelerated Simulations
- Autonomous Experiments
- Secure Data Infrastructure
- Co-Design

Conclusions

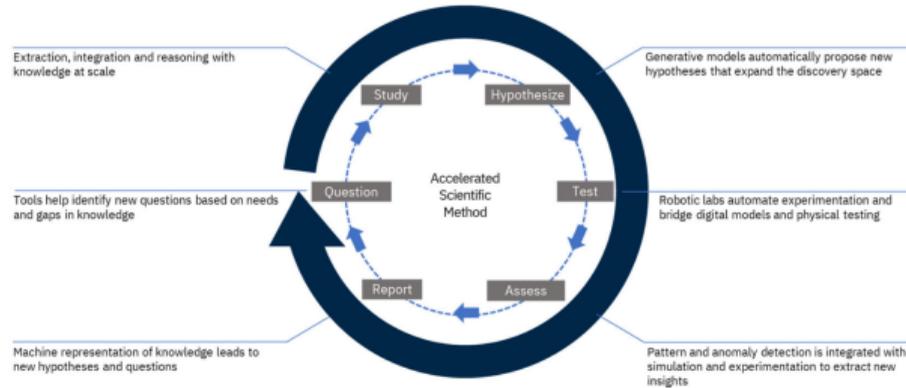
Un Voyage à Travers les Paradigmes Scientifiques



La méthode scientifique est continuellement améliorée par les nouvelles technologies, et l'IA ajoute maintenant une autre étape importante.

- ▶ **La Science est en Constante Évolution** : La façon dont nous menons la recherche a radicalement changé, sous l'impulsion des avancées technologiques.
- ▶ **De l'Empirique au Pilotage par l'IA** : Passage des observations manuelles aux simulations et à l'intégration de l'IA.
- ▶ **Découverte Accélérée** : L'IA accélère l'ensemble du processus scientifique.
- ▶ **L'Avenir** : L'IA et les modèles de fondation pourraient fondamentalement transformer la découverte scientifique.

La Méthode Scientifique Accélérée : Une Boucle Continue



- ▶ **Processus Scientifique Amélioré par l'IA :** Nous utilisons maintenant l'IA pour automatiser toutes les étapes du processus scientifique, de la formulation des questions à la communication des résultats.
- ▶ **Cycles Rapides :** L'IA permet d'itérer rapidement dans la méthode scientifique, en accélérant le processus de découverte.
- ▶ **Nouvelles Découvertes :** Le cycle plus rapide conduit à un rythme plus rapide de nouvelles découvertes.
- ▶ **Un Cycle Continu :** Chaque étape informe la suivante dans une boucle continue.

Récapitulatif : Le Parcours de l'IA pour la Science

- ▶ **Ingénierie Manuelle des Caractéristiques** : L'apprentissage automatique précoce s'appuyait sur des experts pour définir les caractéristiques importantes, avec des limitations en termes de complexité et d'évolutivité.
- ▶ **Apprentissage Profond de Bout en Bout** : Les modèles peuvent apprendre directement les caractéristiques à partir des données, supprimant le besoin d'ingénierie manuelle, mais manquant parfois de connaissances physiques.
- ▶ **Réseaux Neuronaux Informés par la Physique (PINN)** : Combinent des méthodes axées sur les données avec les lois physiques connues, ce qui conduit à des modèles plus robustes et précis, en particulier avec des données limitées.
- ▶ **Modèles de fondation** : La capacité de combiner différents types de données permet de nouvelles découvertes et la capacité d'effectuer des tâches générales.
- ▶ **L'Avenir** : En tirant parti de la puissance de l'IA, nous sommes à l'aube de percées scientifiques sans précédent, repoussant les frontières de la science et de la connaissance.

Conclusion : L'IA n'est plus un ensemble d'outils isolés, mais plutôt un changement fondamental dans la façon dont nous abordons l'exploration scientifique et l'innovation.