

Réseaux de neurones physiquement informés

Alexandre Gachenot Kyriann Loue Alexis Lucas Clément Mazzocchi Mathis Metz Paul Saurin

Résoudre des EDP

Les équations aux dérivées partielles modélisent de nombreux phénomènes physiques : chaleur, fluide, ondes...

- Méthodes classiques : Discrétisation (ex. éléments finis), résolution numérique coûteuse.
- Méthodes d'apprentissage : Approcher la solution via un réseau entraîné sur des données.

Qu'est-ce qu'un réseau de neurones physiquement informé ?

Les Physics-Informed Neural Networks (PINNs) intègrent les lois physiques directement dans la fonction de coût du réseau de neurones. Ils permettent d'approximer des solutions d'EDP sans nécessiter beaucoup de données.

Soit une EDP du premier ordre en temps :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \mathcal{L}u(x, t) = f(x, t), \forall (x, t) \in \Omega \times (0, T] \\ \mathcal{B}u(x, t) = g(x, t), \quad \forall (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T] \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad \forall x \in \Omega \end{cases}$$

La fonction de coût de ce réseau est :

$$\mathcal{C}(\hat{u}_k) = \underbrace{\left\| \frac{\partial \hat{u}_k}{\partial t} + \mathcal{L}\hat{u}_k - f \right\|}_{\text{Physique}}^2 + \underbrace{\|\mathcal{B}\hat{u}_k - g\|^2}_{\text{Bord}} + \underbrace{\|\hat{u}_k(\cdot, 0) - u_0\|^2}_{\text{Initiale}}$$

où \hat{u}_k est l'approximation de la solution de l'EDP à l'itération k .

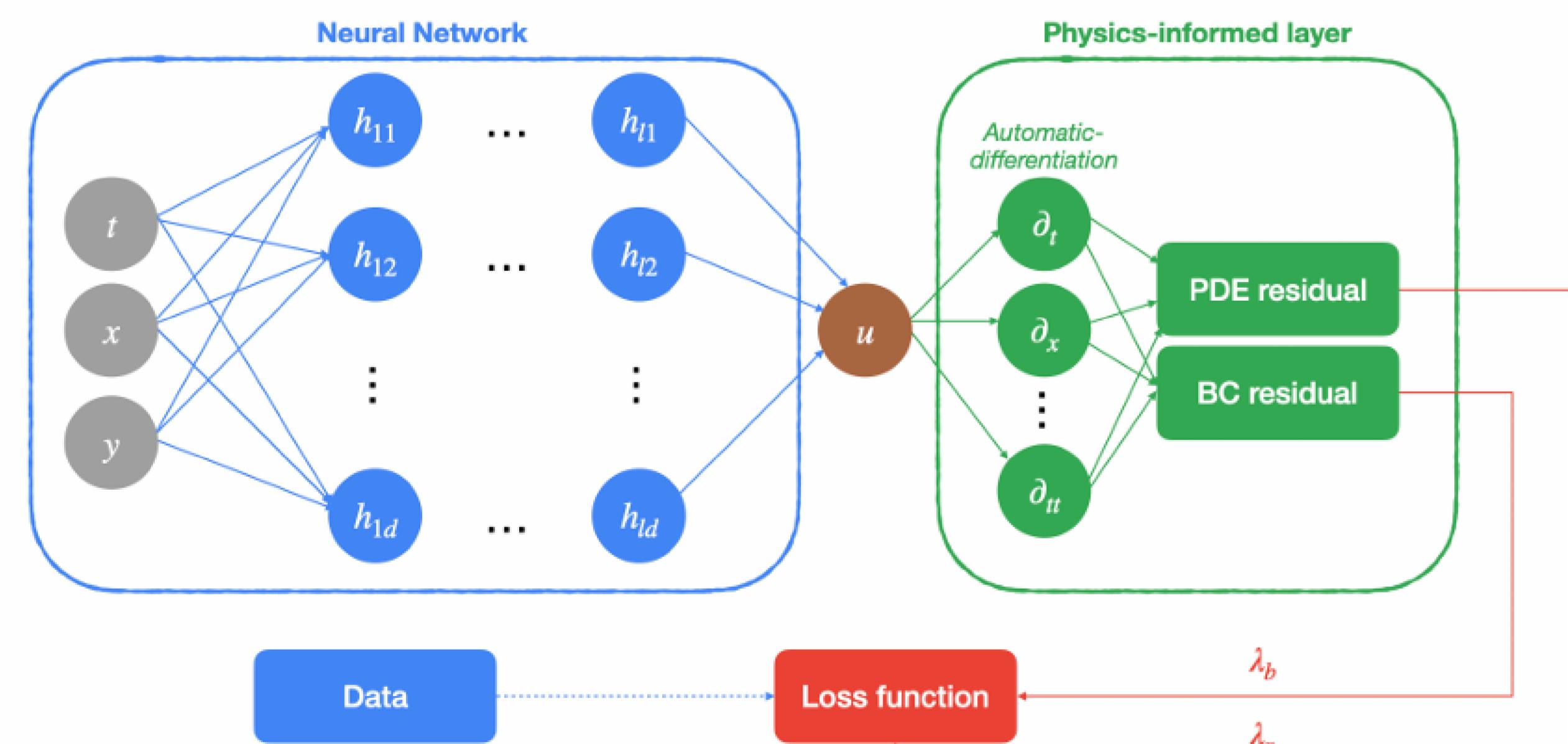


Figure 1. Architecture générale d'un PINN

Pour implémenter et entraîner ces réseaux, nous nous appuyons sur **PhysicsNeMo**, un framework open-source conçu par **NVIDIA**.

Équation de Helmholtz

L'équation de Helmholtz provient de la transformée de Fourier de l'équation des ondes, en supposant une dépendance temporelle harmonique de fréquence ω . Elle modélise la propagation spatiale d'ondes stationnaires avec un éventuel terme source.

$$\Delta u(x) + k^2 u(x) = -f(x), \quad \forall x \in \Omega$$

où $k = \frac{\omega}{c}$ est le nombre d'onde. Nous avons résolu cette équation en 2D avec des conditions de Dirichlet : $u = 0$ sur $\partial\Omega$, mais la méthode s'adapte à d'autres conditions.

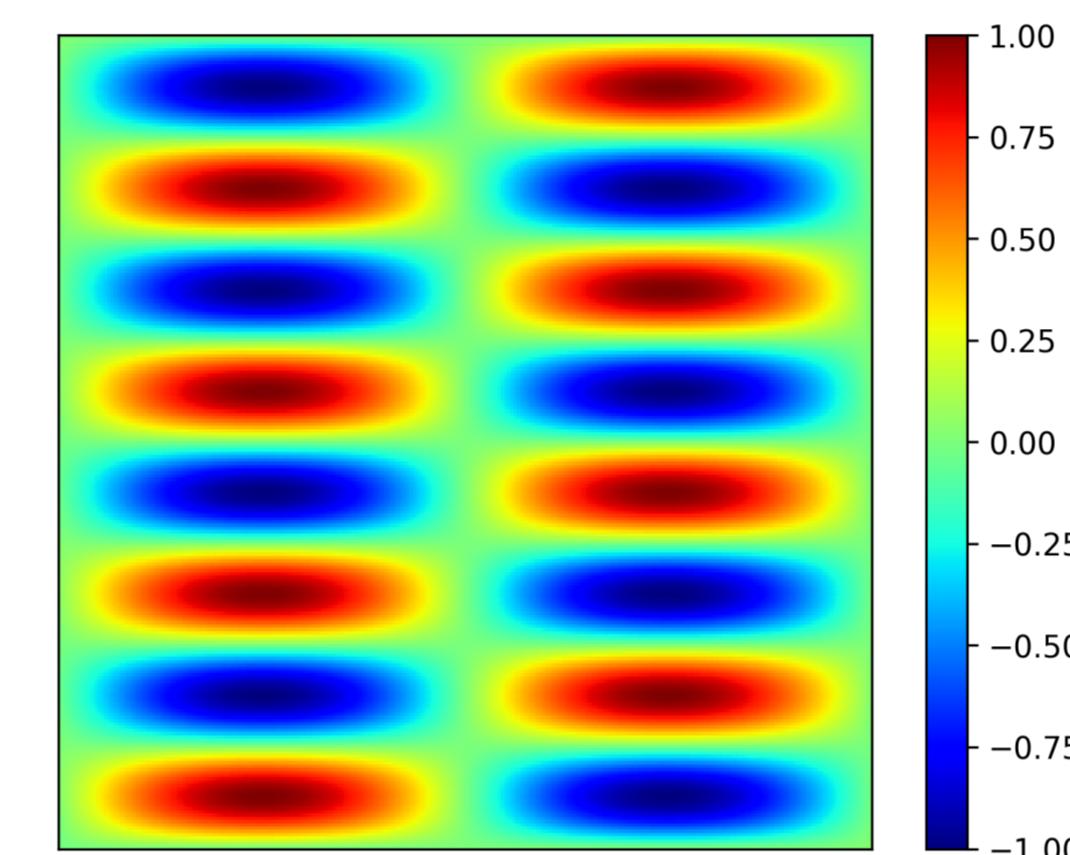


Figure 2. $k = 1$, $f(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(6\pi y)$, $\forall (x, y) \in \Omega$, $u = 0$ sur $\partial\Omega$

Tourbillon isentropique en deux dimensions

Nous avons étudié la dynamique d'un tourbillon isentropique dans un fluide régi par les équations d'Euler, en observant ses effets sur la vitesse, la température et la densité.

L'apprentissage a été réalisé avec un PINN fully connected sur l'intervalle $t \in [0, 20]$, puis extrapolé jusqu'à $t = 40$. Différentes stratégies d'équilibrage des pondérations de la fonction coût ont été étudiées.

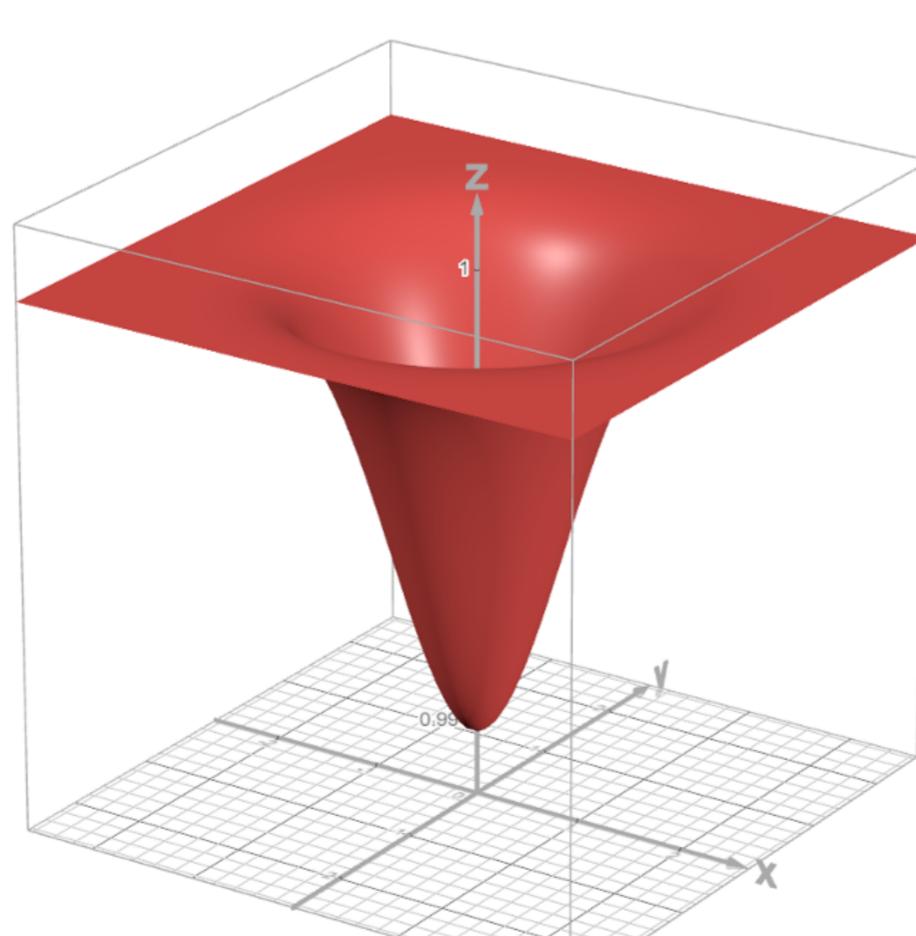


Figure 3. Profil de densité

Le tourbillon est modélisé par une fonction de courant :

$$\psi(x, y) = \frac{b}{2\pi} \exp\left(\frac{1}{2} - \frac{r^2}{2R^2}\right)$$

Les champs de vitesse en coordonnées cylindriques sont :

$$u'_r = 0, \quad u'_\theta = \frac{b}{2\pi R} r \exp\left(\frac{1}{2} - \frac{r^2}{2R^2}\right).$$

Les champs de température et densité :

$$T(r) = T_\infty - \frac{b^2}{8\pi^2 c_P} \exp\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right),$$

$$\rho(r) = \rho_\infty \left(1 - \frac{\rho_\infty b^2 \gamma - 1}{p_\infty 8\pi^2} \exp\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}.$$

Couplage avec un réseau récurrent

Pour améliorer la capacité d'extrapolation temporelle d'un PINN, nous avons exploré un couplage avec un réseau de neurones récurrent (RNN). Le PINN est entraîné sur l'intervalle $t \in [0, 20]$, puis ses prédictions alimentent un réseau récurrent Seq2Seq, capable de prédire la solution sur l'intervalle extrapolié $t \in [20, 40]$.

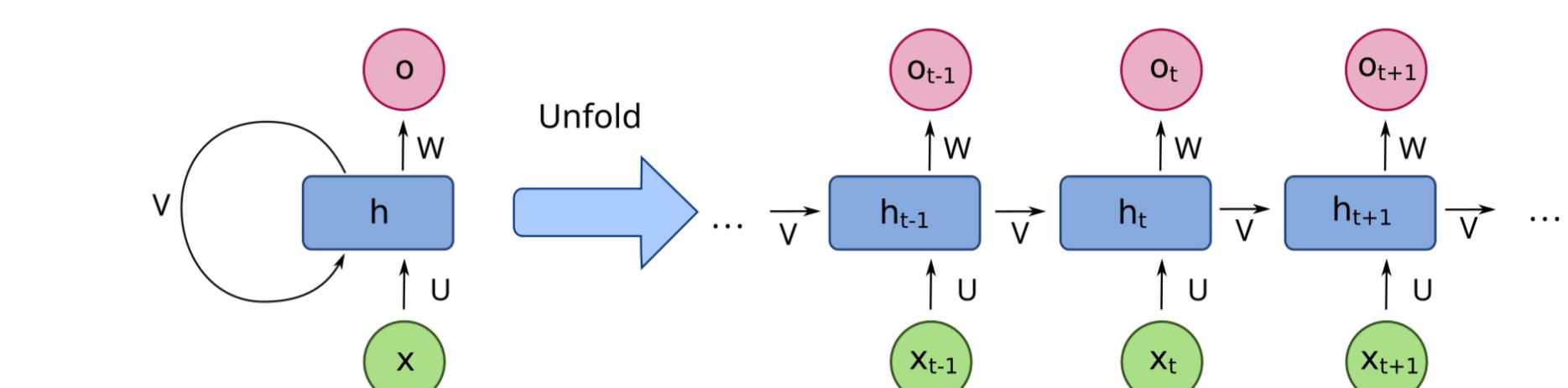
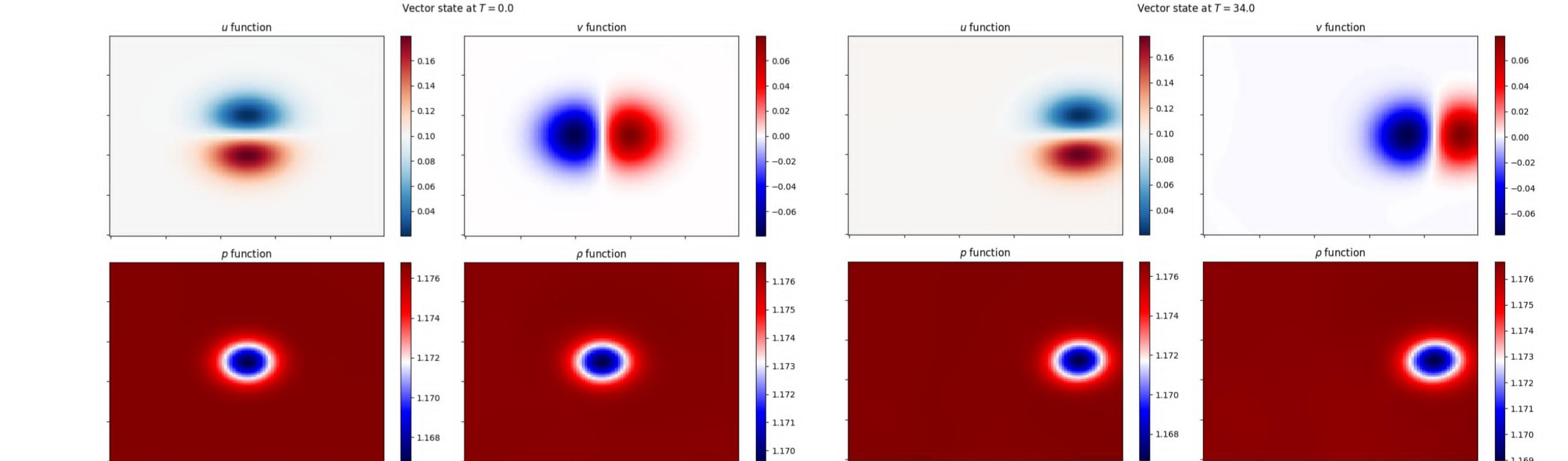


Figure 4. Fonctionnement général d'un RNN

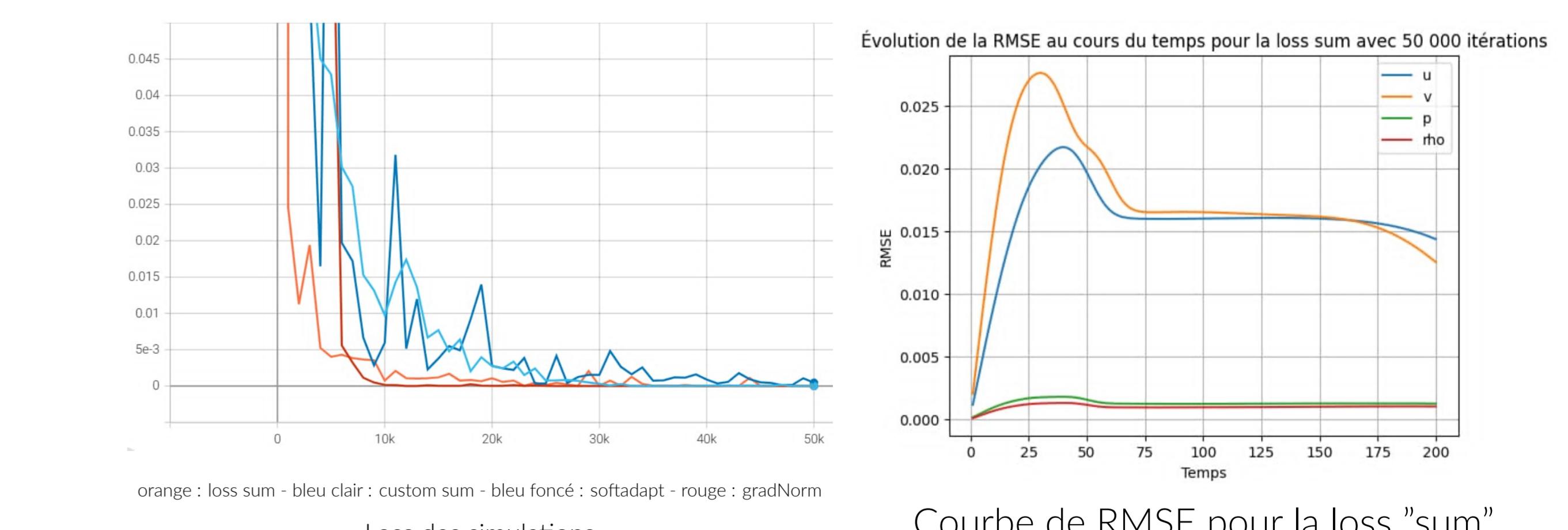
Résultats

Le PINN fully connected appliquée au tourbillon isentropique capture fidèlement la dynamique sur $t \in [0, 20]$ et en extrapolant sur $t \in [20, 40]$, les solutions restent qualitativement bonnes.



Temps $t = 0$

Temps $t = 34$



Courbe de RMSE pour la loss "sum"

L'ajout d'un réseau récurrent Seq2Seq, entraîné à partir des prédictions du PINN, n'a pas permis d'améliorer significativement l'extrapolation.