Sujet de stage

Apprentissage d'opérateurs pour la résolution d'EDP : application à la sécurité incendie

19 octobre 2023

Porteurs : Sébastien Marmin et Sébastien Petit

Résumé : La résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP) en géométries complexes demande des ressources importantes pour les solveurs traditionnels. En alternative, les Physics-Informed Neural Networks (PINNs), basés sur des réseaux de neurones, donnent un cadre général qui peut s'adapter à la modélisation par processus gaussien combinée à des méthodes de régression régularisée. Ces techniques offrent une efficacité accrue et possiblement une meilleure quantification d'incertitude. L'étude se concentre initialement sur les équations de Burgers, avant de viser des simulations plus complexes, comme celles d'incendie. Une revue bibliographique est complétée et des données pour une application en sécurité incendie sont prêtes.

1 Contexte

Soit une équation aux dérivées partielles (EDP) :

$$\begin{array}{rcll} F\left(x,t,u,\partial_x u,\partial_t u,\dots\right) & = & 0, & x\in\Omega,\ t\in T,\\ u(x,0) & = & f_0(x), & x\in\Omega,\\ u(x,t) & = & f_\Gamma(t), & x\in\delta\Omega,\ t\in T, \end{array}$$

pour $T\subset[0,\,\infty[$, sur un domaine Ω et avec des conditions initiales et des conditions aux bords. Des schémas numériques sont habituellement utilisés pour résoudre ce type de problème. Cependant, ces solveurs peuvent être coûteux en ressource de calcul, en particulier si la géométrie est complexe. Des approches potentiellement moins précises mais plus rapides présentent un fort intérêt pratique pour l'industrie. Elles permettent en particulier d'explorer de nombreuses configurations de modélisation pour calibrer un solveur coûteux.

2 Problème scientifique

Après le succès des réseaux de neurones dans le traitement d'images et de texte, l'intérêt pour les Physics-Informed Neural Networks (PINNs) a grandement augmenté.

Cette approche consiste typiquement à substituer u par un réseau de neuronnes $(t, x) \in T \times \Omega \mapsto g(t, x; w)$ dont les poids w sont choisis en optimisant la somme des erreurs

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_1 F^2 \left(x_i, t_i, g(x_i, t_i; w), \partial_x g(x_i, t_i; w), \partial_t g(x_i, t_i; w), \dots\right) \tag{1}$$

$$+\lambda_2 \left(g\left(x_i, 0; w\right) - f_0(x_i)\right)^2 + \lambda_3 \left(g\left(x_i^{(\delta)}, t_i^{(\delta)}; w\right) - f_\Gamma\left(t_i^{(\delta)}\right)\right)^2$$

sur des ensembles de points de collocation $(t_i, x_i) \in T \times \Omega$ situés à l'intérieur du domaine et $(t_i^{(\delta)}, x_i^{(\delta)}) \in T \times \delta\Omega$ sur les bords. Les scalaires λ_i jouent ici le rôle de paramètre de compromis.

La modélisation par processus gaussien [voir, par exemple, 4, 3, 2] constitue une alternative particulièrement intéressante, notamment en raison de son lien avec les méthodes de régression régularisée par norme d'espace hilbertien à noyau reproduisant (RKHS). Dans ce cadre, le problème (1) s'adapte comme suit [voir, par exemple, 5, 1] :

$$\mathrm{argmin}_{g \in H} \sum_{i=1}^{n} \lambda_1 F^2 \left(x_i, t_i, g(x_i, t_i), \partial_x g(x_i, t_i), \partial_t g(x_i, t_i), \dots\right) \tag{2}$$

$$+\lambda_2 \left(g\left(x_i, 0\right) - f_0(x_i)\right)^2 + \lambda_3 \left(g\left(x_i^{(\delta)}, t_i^{(\delta)}\right) - f_\Gamma\left(t_i^{(\delta)}\right)\right)^2 + \mu \left|\left|g\right|\right|_H^2$$

où l'on observe le changement de classe de modèles avec l'introduction du RKHS noté H et l'introduction d'un terme de régularisation donné par la norme de H. En notant $\Omega^T = T \times \Omega$, l'espace fonctionnel H est déterminé de manière unique par le choix d'un noyau $k\colon \Omega^T \times \Omega^T \to \mathbb{R}$ de type positif. Le théorème du représentant et ses généralisations permettent de transformer (2) en un problème numériquement solvable.

Les méthodes à noyau deviennent d'autant plus intéressantes lorsqu'on cherche à respecter des contraintes de manière exacte, comme dans l'exemple présenté en section 1. En effet, en faisant tendre $\lambda_i \to \infty$, on obtient le problème suivant :

$$\mathrm{argmin}_{g \in C} \left|\left|g\right|\right|_H \tag{3}$$

avec C l'ensemble des fonctions $g \in H$ telles que :

$$\begin{cases} F\left(x_i, t_i, g(x_i, t_i), \partial_x g(x_i, t_i), \partial_t g(x_i, t_i), \dots\right) = 0, \\ g\left(x_i, 0\right) = f_0(x_i), \\ g\left(x_i^{(\delta)}, t_i^{(\delta)}\right) = f_\Gamma\left(t_i^{(\delta)}\right), \end{cases} \quad . \tag{4}$$

aux points de collocation.
Ce problème peut également être résolu numériquement. On notera que l'ensemble C ci-dessus n'est pas nécessairement un espace linéaire du fait de la potentielle non-linéarité de F. Il n'existe pas (à notre connaissance) de technique standard dans ce cadre pour la quantification d'incertitude. D'autre part, l'implémentation numérique fait intervenir une matrice mal conditionnée de grande taille [voir par exemple, 1, annexe A.1], ce qui pourra engendrer des problèmes de scalabilité.

Dans un premier temps, les équations de Burgers seront étudiées afin de tester la faisabilité de ce type d'approche. Notamment, des techniques d'inférence scalables pour les processus gaussiens pourront être évaluées avant de s'attaquer aux équations de Navier Stokes pour des écoulements à faible vitesse dans le cadre de la simulation incendie.

3 Applications

De nombreux secteurs industriels, comme l'aéronautique et le nucléaire, utilisent des codes numérique souvent coûteux en ressource de calcul. Au LNE, dans le cadre d'études d'ingénierie de désenfumage assurant la sécurité incendie d'établissements recevant du public, l'outil FDS (Fire Dynamic Simulator) est utilisé pour résoudre numériquement une forme des équations de Navier-Stokes (transport des fumées et de la chaleur par écoulements lents).

Dans ce contexte, le recours à des méta-modèles permettant d'émuler rapidement le comportement de ce type de code coûteux offre des perspectives intéressantes. Un méta-modèle performant permettrait notamment de pouvoir réaliser des analyses de sensibilité et surtout de pouvoir éliminer rapidement des mesures de désenfumage pour une configuration donnée, l'avis d'experts étant privilégié pour le moment.

Références

[1] Y. Chen, B. Hosseini, H. Owhadi, and A. M. Stuart. Solving and learning nonlinear PDEs with Gaussian processes. *Journal of Computational Physics*, 447 :110668, 2021.

[2] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams. *Gaussian Processes for Machine Learning*. Adaptive Computation and Machine Learning. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2006.

[3] T. J. Santner, B. J. Williams, and W. I. Notz. *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer series in statistics. Springer, 2003.

[4] M.L. Stein. *Interpolation of Spatial Data : Some Theory for kriging*. Springer Series in Statistics. Springer New York, 1999.

[5] F. Tronarp, S. Särkkä, and P. Hennig. Bayesian ODE solvers : the maximum a posteriori estimate. *Statistics and Computing*, 31(3) :23, 2021.

LARTISSTE
research initiative on
uncertainty quantification
@paris-saclay

LABORATOIRE NATIONAL DE MÉTROLOGIE ET D'ESSAIS

LABORATOIRE NATIONAL DE METROLOGIE ET D'ESSAIS

STAGE

Direction de la Métrologie Scientifique et Industrielle
Département Sciences des données et incertitudes

Réf : STA/EDP/DMSI

Lieu : Bassin de St Quentin-en-Yvelines / Trappes (78)

Durée : 6 mois à compter de MARS/AVRIL 2024

Apprentissage d'opérateurs pour la résolution d'EDP : application à la sécurité incendie

---

Le LNE : www.lne.fr

Leader dans l'univers de la mesure et des références, jouissant d'une forte notoriété en France et à l'international, le LNE soutient l'innovation industrielle et se positionne comme un acteur important pour une économie plus compétitive et une société plus sûre.
Au carrefour de la science et de l'industrie depuis sa création en 1901, le LNE offre son expertise à l'ensemble des acteurs économiques impliqués dans la qualité et la sécurité des produits.
Pilote de la métrologie française, notre recherche est au cœur de notre mission de service public et constitue un facteur fondamental au soutien de la compétitivité des entreprises.
Nous avons à cœur de répondre aux exigences des industriels et du monde académique, pour des mesures toujours plus justes, effectuées dans des conditions de plus en plus extrêmes ou sur des sujets innovants tels que les véhicules autonomes, les nanotechnologies ou la fabrication additive.

Contexte du stage :

Dans le cadre d'études d'ingénierie de désenfumage assurant la sécurité incendie d'établissements recevant du public, l'outil FDS (Fire Dynamic Simulator) est utilisé pour résoudre numériquement une forme des équations de Navier-Stokes. Cependant, son coût en temps de calcul est conséquent.
En alternative, les Physics-Informed Neural Networks (PINNs), basés sur des réseaux de neurones, donnent un cadre général qui peut s'adapter à la modélisation par processus gaussien [voir par exemple, 4, 3, 2] combinée à des méthodes de régression régularisée [voir par exemple, 5, 1]. Ces techniques offrent une efficacité accrue et permettent potentiellement une meilleure quantification de l'incertitude.
L'idée principale est de substituer le réseau de neurones par une fonction appartenant à un RKHS (une classe de fonctions particulière déterminée par un noyau). Il est possible alors de reformuler les contraintes physiques en un problème de minimisation de norme sur un ensemble restreint, qui peut être résolue numériquement. Il n'existe pas (à notre connaissance) de technique standard dans ce cadre pour la quantification d'incertitude. D'autre part, l'implémentation numérique fait intervenir une matrice mal conditionnée de grande taille ce qui pourra engendrer des problèmes de scalabilité.

Missions :

Intégré(e) au sein du département Science des Données et Incertitudes, votre rôle dans un premier temps sera d'étudier les équations de Burgers afin de tester la faisabilité de ce type d'approche. Notamment, des techniques d'inférence scalables pour les processus gaussiens pourront être évaluées avant de s'attaquer aux équations de Navier Stokes pour des écoulements à faible vitesse dans le cadre de la simulation incendie.
Les développements à réaliser au cours de ce stage s'articulent donc de la manière suivante :

- Vous familiariser avec les méthodes de modélisation par noyau intégrant des EDP.
- Mettre en œuvre un modèle prédictif pour un cas test sur des EDP de type Burgers. Vous explorerez également les possibilités d'estimation d'erreur.
- Évaluer l'application des développements pour un cas typique en sécurité incendie.
- Rédiger un rapport scientifique synthétisant vos résultats.

Profil :

Étudiant(e) en M2 ou en dernière année d'école d'ingénieur, spécialisé(e) en mathématiques appliquées (modélisation statistique et machine learning). Doté(e) d'une forte curiosité scientifique et d'un intérêt pour la simulation physique, vous avez déjà acquis des compétences en modélisation ou apprentissage automatique. La maîtrise d'un langage de programmation, tel que Python, est essentielle. Des connaissances en analyse fonctionnelle seront appréciées.

Ce stage pourra donner lieu à une thèse.

Gratification :

Stage gratifié.

Pour candidater :

Envoyez votre candidature à : sebastien.marmin@lne.fr et à sebastien.petit@lne.fr en rappelant en objet du mail la référence de l'offre indiquée en 1ère page (STA/EDP/DMSI)

Références :

[1] Y. Chen, B. Hosseini, H. Owhadi, and A. M. Stuart. Solving and learning nonlinear PDEs with Gaussian processes. Journal of Computational Physics, 447 :110668, 2021.

[2] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams. Gaussian Processes for Machine Learning. Adaptive Computation and Machine Learning. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2006.

[3] T. J. Santner, B. J. Williams, and W. I. Notz. The Design and Analysis of Computer Experiments. Springer series in statistics. Springer, 2003.

[4] M.L. Stein. Interpolation of Spatial Data : Some Theory for kriging. Springer Series in Statistics. Springer New York, 1999.

[5] F. Tronarp, S. Särkkä, and P. Hennig. Bayesian ODE solvers : the maximum a posteriori estimate. Statistics and Computing, 31(3) :23, 2021.