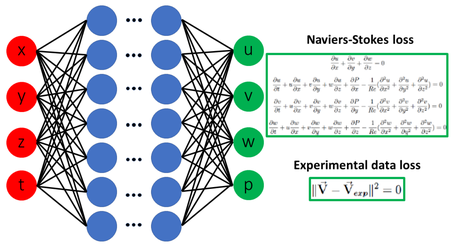
Equation de Helmholtz : Physics-Informed Neural Networks

Beaujoin, Garbaya, Weissberg

Ponts ParisTech - Airbus

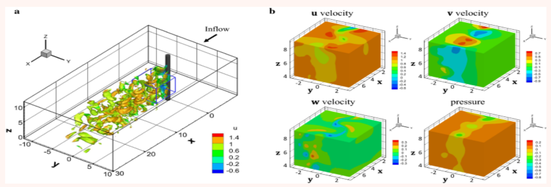
Introduction



Les PINNs sont des approximateurs de fonctions universels qui peuvent intégrer la connaissance des lois physiques qui régissent un ensemble de données dans le processus d'apprentissage et peuvent être décrits par des équations aux dérivées partielles (PDE). Cette idée d'intégration des connaissances physiques est très prometteuse dans la communauté scientifique même si nous manquons encore de connaissances et de maîtrise de ces outils. L'idée générale est d'intégrer l'erreur aux bords ainsi que le résidu de l'EDP dans la loss du réseau de neurones.

Motivations à l'utilisation de PINNs

- Intégration de connaissances physiques.
- Réduction de la nécessité de données étiquetées : c'est un apprentissage non supervisé.
- Flexibilité dans la résolution de problèmes complexes : les PINNs peuvent être appliqués à une large gamme de problèmes en physique, notamment la mécanique des fluides, la dynamique des structures et l'électromagnétisme.
- Réduction du coût de calcul : en utilisant des modèles neuronaux, les PINNs peuvent être plus efficaces par rapport aux méthodes de résolution numérique traditionnelles.



Notre projet

L'équation de Helmholtz. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui apparaît dans divers domaines de la physique, notamment en acoustique, en électromagnétisme et en mécanique quantique. Elle est utilisée pour décrire la propagation des ondes dans un milieu. L'équation de Helmholtz est donnée en général par:

$$\nabla^2 u + k^2 u = f \tag{1}$$

où u est une fonction d'onde, et k est le nombre d'onde. f est une fonction qui représente un terme source. Il suffit d'y rajouter une condition aux bords (Dirichlet, Neumann, etc...) pour que l'équation soit complète.
Dans notre projet, nous cherchons donc à obtenir des approximations de solutions de l'équation de Helmholtz dans différents cas d'études, grâce aux Physics-Informed Neural Networks. Pour ce faire, nous implémentons ces réseaux en python en utilisant des framework comme Pytorch et Tensorflow.

Les différents cas d'études

Nous étudions et testons plusieurs cas de l'équation d'Helmholtz dont par exemple:

- Un cas simple:

$$-\Delta\varphi(x) - \omega^2\varphi(x) = f(x) \quad \text{in } \Omega \subset R; \quad \varphi = 0 \quad \text{on } \partial\Omega$$

- Type guide d'onde:

$$-\Delta\varphi(x) - \omega^2\varphi(x) = f(x) \quad \text{in } \Omega$$
$$\text{C.L. : } \varphi = 0 \quad \text{on } \{x = \pm h\} \cup \{y = L\}; \quad \partial_n\varphi - ik\varphi = 0 \quad \text{on } \{y = -L\}$$

- Eq. convectée avec un type d'écoulement Jet:

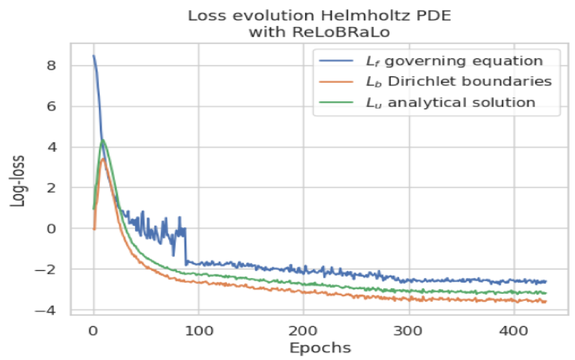
$$\big(-ik + \boldsymbol{M}(x)\cdot\boldsymbol{\nabla}\big)^2\varphi - \Delta\varphi(x) = f(x)$$

$$f(x) = \exp(-\|x - x_m\|^2/2\sigma^2); \quad (PML)$$

$$\boldsymbol{M}(x,y) = M(x)\boldsymbol{e}_x, \quad \text{où } M(x) = M_\infty + \delta M e^{-(x-x_m)^2/2\sigma^2}$$

Difficultés et solutions

- **Indicateurs de performance**: Une première difficulté est qu'en fonction du cas d'étude, l'équation de Helmholtz étudiée possède ou non une solution analytique dont on connaît l'expression. Les cas où aucune solution analytique n'est connue posent problème car l'optimisation de la loss du réseau ne garantit pas une convergence vers la solution souhaitée.
- Une autre difficulté est que l'on ne possède pas de points en lesquels on connaît la solution (apprentissage non supervisé). Le réseau de neurones cherche donc juste à **minimiser la loss résiduelle** de l'EDP en des points de collocation répartis sur tout le domaine ainsi que **l'erreur sur les bords**, de façon à ce que la solution prédite respecte les conditions aux limites.
- **Montée en fréquence** : on a étudié des articles dans lesquels était démontré le résultat suivant : les réseaux de neurones apprennent moins bien les fonctions de haute fréquence. Ceci devrait alors se présenter lorsque l'on augmente la valeur de k dans l'équation (1). Une solution possible pour remédier à ce problème est d'utiliser les *Fourier features*.
- **Équilibrage des loss**: Un défi majeur de cette approche est de trouver une bonne stratégie de pondération des loss. L'expérience dit qu'en général, l'ordre de grandeur du résidu est beaucoup plus important que celui de la loss aux bords. L'optimisation de la simple somme des deux loss est donc une mauvaise idée. **Une solution** est de pondérer la combinaison des deux loss d'une manière statique ou dynamique (Adaptative) lors de l'entraînement.



Exemple de solution obtenue

On cherche à approximer la solution de : $\Delta u + k^2 u = f$ où le terme source f est donné par : $f(x,y) = (-\pi^2 - (4\pi)^2 + k^2)sin(\pi x)sin(4\pi y)$. Les conditions aux bords sont Dirichlet homogènes : $u(-1,y) = u(1,y) = u(x,-1) = u(x,1) = 0$. On connaît la solution analytique : $u(x,y) = sin(\pi x)sin(4\pi y)$.
Voici la solution obtenue avec un PINN, avec k=100, avec 4000 points de collocation dans le domaine et 100 sur chaque bord :

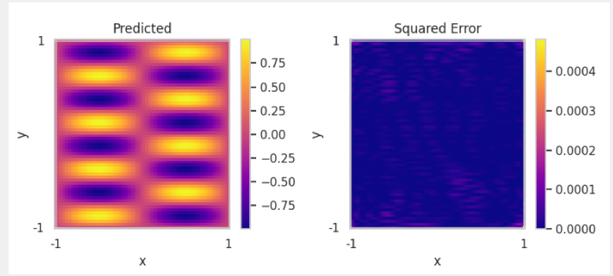
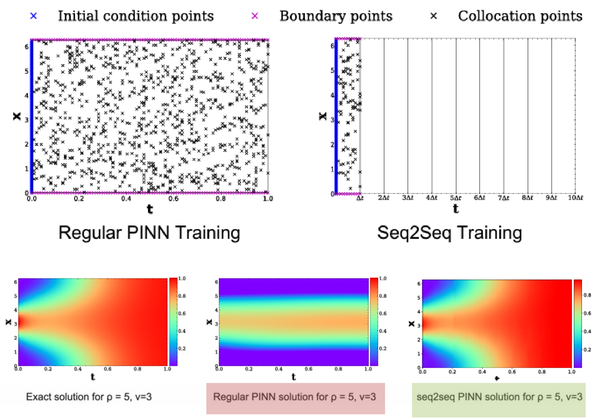


Figure 1. A gauche la solution prédite par le PINN et à droite l'erreur quadratique par rapport à la solution analytique.

Ouverture et autres méthodes

- Travailler sur les **architectures** de nos réseaux de nourones pourrait nous permettre d'obtenir des meilleures approximations. Pour l'instant on a fait des tests avec des architectures relativement simples (enchaînement de quelques couches linéaire/fonction d'activation).
- Dans le cas d'évolution spatio-temporelle (beaucoup plus compliqué), on parle souvent dans la littérature de l'utilité que pourrait apporter une **approche séquentielle** en le temps. Elle permet de faciliter la convergence du réseau en réalisant l'entraînement sur des sous domaines temporels et en intégrant un mécanisme de mémoire dans cette approche.



- Les PINNs sont très prometteurs, flexibles et pas très compliqués à impémenter. Mais il y a beaucoup de questions ouvertes sur comment et pourquoi cette approche fonctionne/échoue selon les cas. Notre objectif est d'avoir une meilleure compréhension et maîtrise de ces approximateurs.