

Séminaire EDP

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

N. Crouseilles³⁴, E. Franck¹², L. Navoret¹²,
G. Steimer¹² & V. Vigon¹

23 novembre 2022

³INRIA Rennes - Bretagne Atlantique, France

⁴IRMAR, Université de Rennes, France

¹IRMA, Université de Strasbourg, France

²INRIA Nancy - Grand-Est, France

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

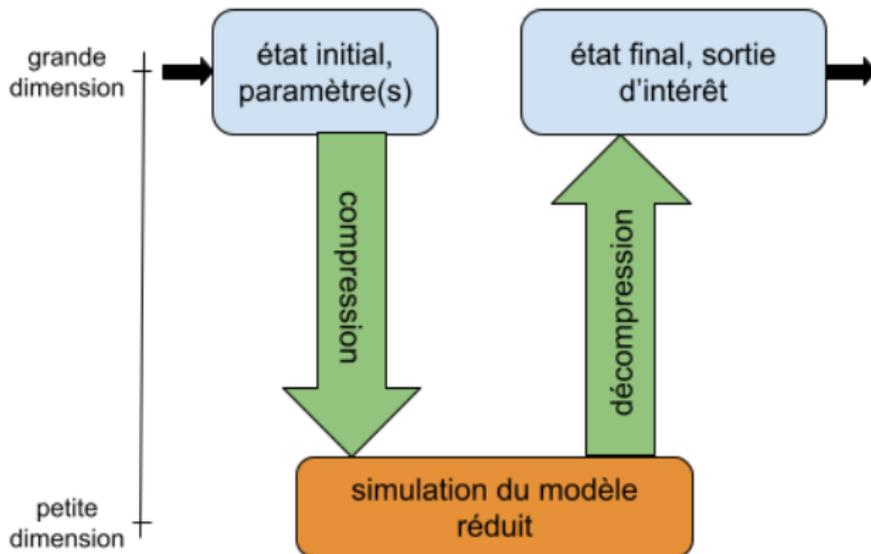


Figure: Schéma du processus

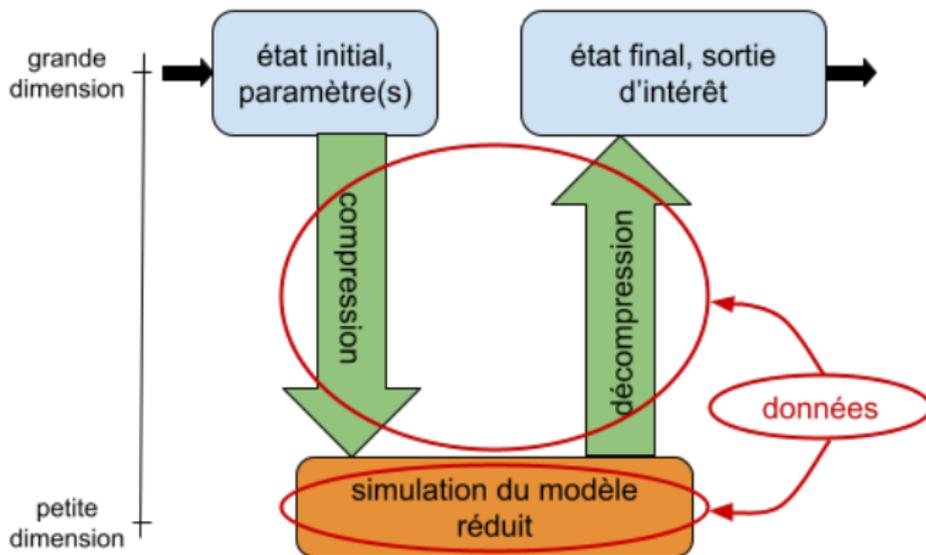


Figure: Schéma du processus, étapes par apprentissage machine en rouge

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Réduction du
modèle de
Vlasov-Poisson
guidée par les
données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ plasma 1D sans collisions, non relativiste, limite électrique $|E + E_{ext}| \gg c|B|$,
- ▶ modèle cinétique: distribution statistique $f(x, v, t)$ de particules,
- ▶ équation de **Vlasov** - **Poisson**:

$$\partial_t f + v \nabla_x f + \frac{q}{m} (E + E_{ext}) \nabla_v f = 0,$$

$$E = -\nabla \phi, \quad \Delta \phi = -\rho = -q \int f dv,$$

- ▶ $x(t), v(t)$ position et vitesse, t temps, q, m charge et masse,
- ▶ $\phi(x(t))$ potentiel électrique, $\rho(x(t))$ densité de charge,
- ▶ E, E_{ext} champs électriques auto-induit et externe (donné).
- ▶ \rightarrow équation de transport (fortement) non linéaire!

Soit $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times (0, +\infty))$ une fonction test et $T \in \mathbb{R}_+^*$ tel que $\text{supp } \psi(x, v, \cdot) \subset [0, T]$ alors:

$$\langle f_N, \psi \rangle = \sum_i w_i \int_0^T \psi(x_i, v_i, t)$$

Par dérivation:

$$\langle \partial_t f_N, \psi \rangle = -\langle f_N, \partial_t \psi \rangle = -\sum_i w_i \int_0^T \partial_t \psi(x_i, v_i, t)$$

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Soit $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times (0, +\infty))$ une fonction test et $T \in \mathbb{R}_+^*$ tel que $\text{supp } \psi(x, v, \cdot) \subset [0, T]$ alors:

$$\langle f_N, \psi \rangle = \sum_i w_i \int_0^T \psi(x_i, v_i, t)$$

Par dérivation:

$$\langle \partial_t f_N, \psi \rangle = -\langle f_N, \partial_t \psi \rangle = -\sum_i w_i \int_0^T \partial_t \psi(x_i, v_i, t)$$

Or,

$$\frac{d}{dt} \psi(x_i, v_i, t) = (\dot{x}_i \nabla_x \psi + \dot{v}_i \nabla_v \psi + \partial_t \psi)(x_i, v_i, t)$$

Soit $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times (0, +\infty))$ une fonction test et $T \in \mathbb{R}_+^*$ tel que $\text{supp } \psi(x, v, \cdot) \subset [0, T]$ alors:

$$\langle f_N, \psi \rangle = \sum_i w_i \int_0^T \psi(x_i, v_i, t)$$

Par dérivation,

$$\langle \partial_t f_N, \psi \rangle = -\langle f_N, \partial_t \psi \rangle = -\sum_i w_i \int_0^T \partial_t \psi(x_i, v_i, t)$$

Or,

$$\frac{d}{dt} \psi(x_i, v_i, t) = (\dot{x}_i \nabla_x \psi + \dot{v}_i \nabla_v \psi + \partial_t \psi)(x_i, v_i, t)$$

Par injection,

$$\langle \partial_t f_N, \psi \rangle = \sum_i w_i \left[\int_0^T \dot{x}_i \nabla_x \psi + \dot{v}_i \nabla_v \psi dt - \int_0^T \frac{d}{dt} \psi dt \right]$$

- ▶ cette EDO en grande dimension $2N$:

$$\begin{cases} \dot{x}_i = v_i, \\ \dot{v}_i = \frac{q}{m}(E + E_{ext})(x_i), \\ x_i(0) = x_i^0, v_i(0) = v_i^0. \end{cases}$$

est le point de départ de notre méthode.

- ▶ *Remarque:* cette EDO est celle obtenue par application des lois de Newton.

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Réduction du
modèle de
Vlasov-Poisson
guidée par les
données

Guillaume Steimer

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ cas d'un système conservatif ou hamiltonien; on note $x = (x_i), v = (v_i) \in \mathbb{R}^N$,
- ▶ $u = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N}$ suit une dynamique hamiltonienne associée à $\mathcal{H} : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}$ si $\dot{u} = \mathbb{J}_{2N} \nabla_u \mathcal{H}(u)$,
- ▶ $\mathbb{J}_{2N} := \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_N \\ -\mathbb{I}_N & 0 \end{pmatrix}$
- ▶ formulation symplectique: $\forall t > 0, \mathcal{H}(u(t)) = \mathcal{H}(u(0))$,
- ▶ \mathcal{H} : hamiltonien associé, en physique: énergie du système,
- ▶ nécessité de schémas numériques symplectiques \rightarrow stabilité numérique.

- ▶ ici:

$$\mathcal{H}(u(t)) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} v_i^2(t) + \frac{q}{m} \phi(x_i(t)) \right]$$

- ▶ hamiltonien séparé $\mathcal{H}(u) = \mathcal{H}^x(x) + \mathcal{H}^v(v)$,

- ▶ calcul de E en 3 étapes: calcul de la densité $\rho \rightarrow$ du potentiel $\Delta\phi = -\rho \rightarrow E = -\nabla\phi$
- ▶ difficulté de l'EDO: calcul de E à chaque pas $\rightarrow \mathcal{O}(N^2)$,
- ▶ idée: passer par un maillage de taille $M \ll N \rightarrow \mathcal{O}(MN)$,
- ▶ aboutit à un algorithme PIC (Particle In Cell), en 2 étapes répétées:
 - ▶ particle mover: résolution de la dynamique sur un pas de temps,
 - ▶ field solver: calcul de E en passant par un maillage.

- ▶ résolution de l'EDO sur un pas de temps,
- ▶ on note (x^n, v^n) position et vitesse au n-ième pas de temps,
- ▶ schéma symplectique: Störmer-Verlet (ordre 2):

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} (x^{n+1} - x^n) = v^{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\Delta t} \left(v^{n+\frac{1}{2}} - v^{n-\frac{1}{2}} \right) = \frac{q}{m} \left(E_{\text{ext}}(x^n) + E^n(x^n) \right) \end{cases}$$

- ▶ schéma rapide et précis,
- ▶ champ $E^n(x^n)$ auto-consistant connu.

- ▶ calcul de $E^n(x^n)$ par un champ moyen E_M^n sur un maillage de M noeuds séparés par Δx , 4 étapes:
- ▶ 1: calcul de $\rho_M^n = (\rho_i^n)$ à chaque noeud, boucle sur chaque particule:
 - ▶ particule de position \tilde{x} : répartir charge q entre les noeuds $i = \lfloor \tilde{x}/\Delta x \rfloor$ et $i + 1$ voisins:

$$\rho_i^n += \bar{\rho} \frac{\Delta x - h}{\Delta x}, \quad \rho_{i+1}^n += \bar{\rho} \frac{h}{\Delta x} \quad \text{où} \quad \bar{\rho} = \frac{q}{\Delta x}.$$

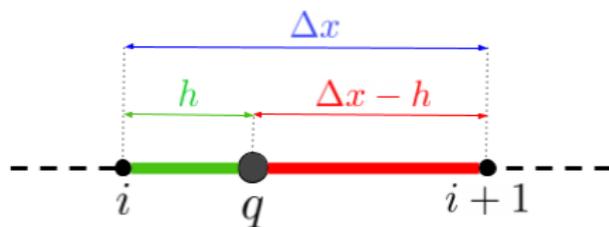


Figure: Illustration de la répartition de la charge

- ▶ 2: calcul de $\Delta\phi_M^n = -\rho_M^n$ par différences finies,
- ▶ 3: calcul de $E_M^n = -\nabla\phi_M^n$ par différences finies centrées,
- ▶ 4: interpolation de E_M^n en $x^n \rightarrow E^n(x^n)$.

Field solver

- ▶ illustration du field solver avec conditions aux bords de Neumann, $N = 3, M = 6, q/m = +1$,
- ▶ calcul de la densité et du potentiel:

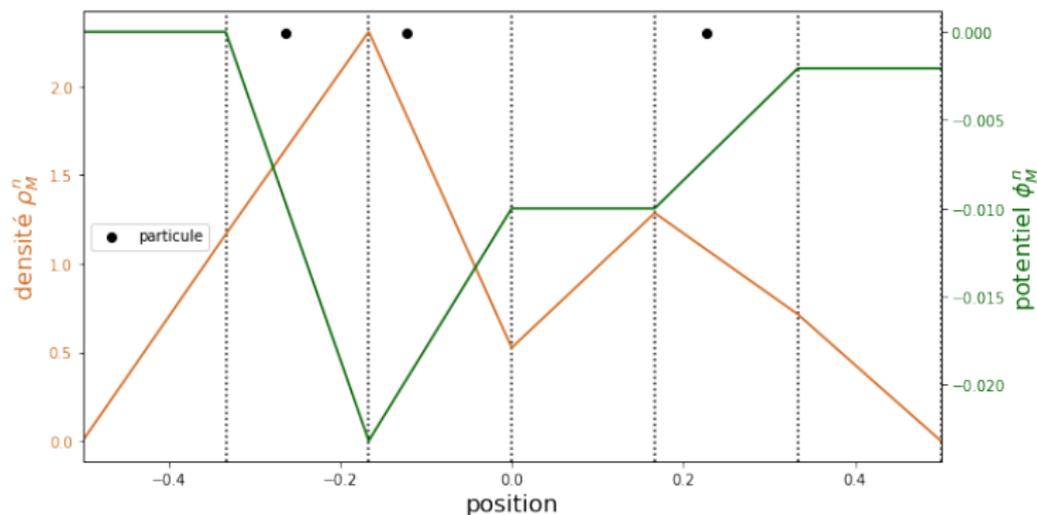


Figure: densité ρ_M^n et potentiel ϕ_M^n sur grille

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ EDO en dimension $2N$ très coûteuse,
- ▶ solution: trouver des vitesses-positions réduites

$$\bar{u} = \begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{v} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2K}, K \ll N \text{ qui:}$$

- ▶ suivent une EDO réduite (symplectique) en dimension $2K$,
- ▶ fidèle à la solution $u \in \mathbb{R}^{2N}$ paramétrée par μ (e.g. t, u^0),
- ▶ MAIS pour un domaine (restreint) de paramètres,
- ▶ compression-décompression $u \leftrightarrow \bar{u}$ rapide,

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ principe de la réduction:

$$u(t; \mu) = u_{\text{ref}}(\mu) + \mathcal{D}(\bar{u}(t; \mu)),$$

- ▶ avec $\mathcal{D} : \mathbb{R}^{2K} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ l'opérateur de décodage,
- ▶ i.e. u est proche d'une variété de basse dimension $2K$,
- ▶ pseudo-inverse de \mathcal{D} : l'encodeur \mathcal{E} ,
- ▶ on les construit à partir de U "snapshots" de solutions:

$$U = (u(t_1; \mu_1) \quad \cdots \quad u(t_f; \mu_d))$$

Limite des méthodes classiques

- ▶ PSD (Proper Symplectic Decomposition) [4] inspirée de la POD (Proper Orthogonal Decomposition),
- ▶ hypothèse: linéarité de u par rapport aux paramètres $\mu \rightarrow$ réduction linéaire $\mathcal{D}(\bar{u}(t; \mu)) = A\bar{u}(t; \mu)$ et pseudo-inverse symplectique A^+ ,
- ▶ A construit par SVD de U (solution de $\min_A \|u - AA^+u\|_2^2$),
- ▶ A, A^+ préservent $\dot{u} = \mathbb{J}_{2N} \nabla_u \mathcal{H}(u)$ i.e.
$$\dot{\bar{u}} = \mathbb{J}_{2K} \nabla_{\bar{u}} \mathcal{H}(A\bar{u})$$
- ▶ fournit un modèle réduit symplectique,
- ▶ hypothèse suffisante avec une EDP linéaire ($E \equiv 0$),
- ▶ mais insuffisante dans le cas fortement non linéaire ($E \not\equiv 0$).

- ▶ exemple dans le cas linéaire, $N = 1000$ particules, $K = 7$ et $E_{\text{ext}}(x) = 3 \cos(6\pi x)$, on fixe $q/m = -1$.

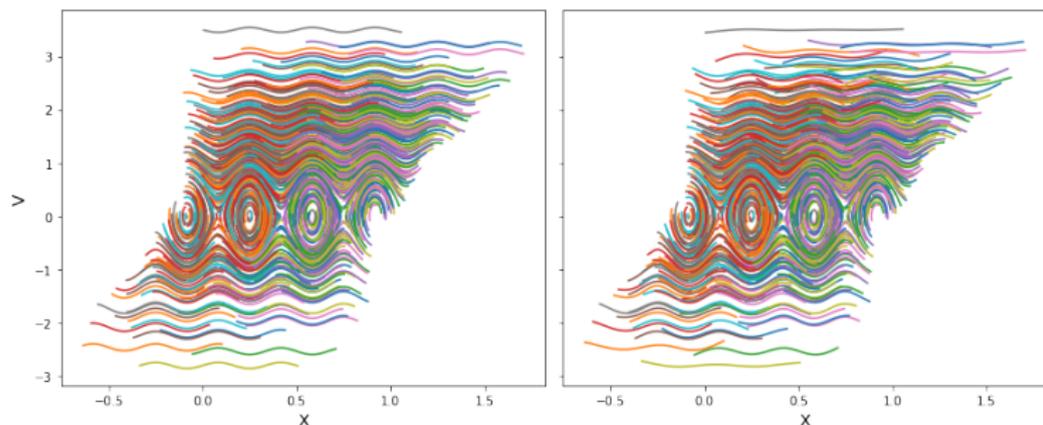


Figure: Trajectoires de référence par PIC (gauche) et obtenues par PSD (droite)

Limite des méthodes classiques

- ▶ exemple: cas non linéaire, $N = 1000$ particules confinées par E_{ext} : zone libre de taille $L_{libre} = 1.2$ et d'intensité I ,

$$E_{ext}(x) = \begin{cases} I \left(x + \frac{L_{libre}}{2}\right)^3 & \text{si } x < -\frac{L_{libre}}{2}, \\ 0 & \text{si } -\frac{L_{libre}}{2} < x < \frac{L_{libre}}{2}, \\ I \left(x - \frac{L_{libre}}{2}\right)^3 & \text{sinon} \end{cases}$$

- ▶ rappel: accélération: $-E_{ext}$

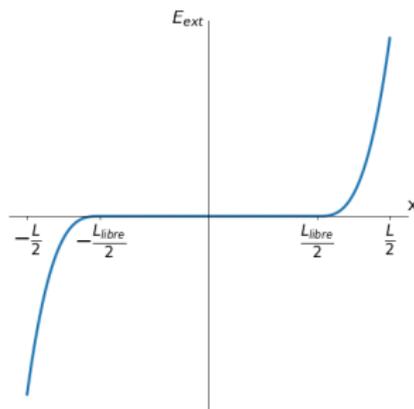


Figure: Champ confinant

- ▶ $K = 7$.

- ▶ réseau de neurones = fonction paramétrique de paramètres $\theta \in \Theta$,
- ▶ θ ajusté sur un jeu de données:
 - ▶ pour minimiser une fonction coût ou loss \mathcal{L} ,
 - ▶ par une descente de gradient,
- ▶ vu comme succession d'opérations qu'on appelle couches e.g.:
 - ▶ couche dense d'entrée x , de sortie $\sigma(Wx + b)$, avec une matrice de poids W , un biais b et une non-linéarité σ ,
 - ▶ couche de convolution où les noyaux sont des poids,
- ▶ θ = ensemble des poids de toutes les couches.

Rappels sur les réseaux de neurones

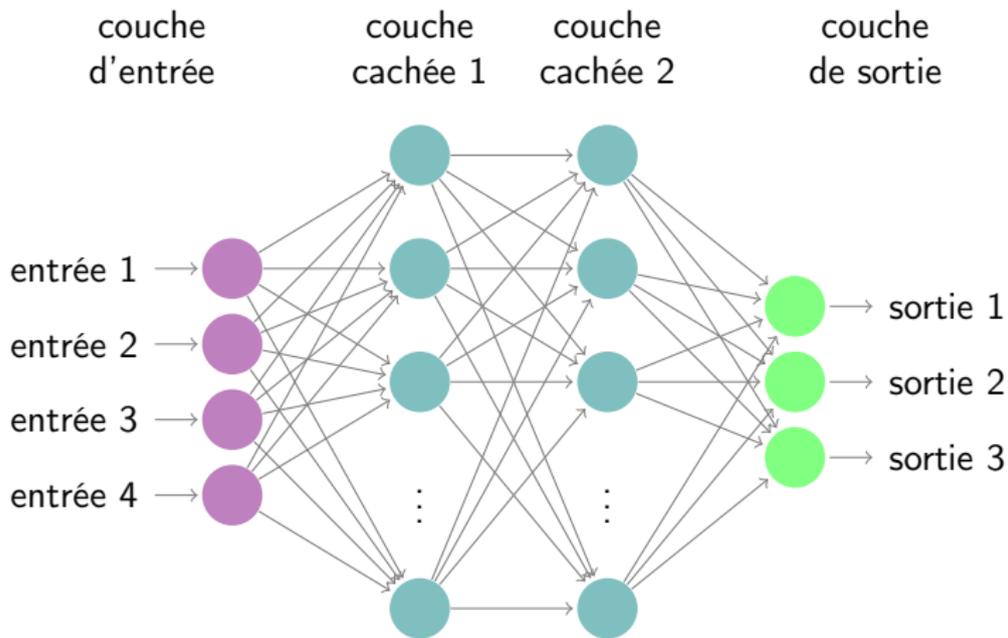


Figure: Exemple de réseau de neurones

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne
Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Réduction par auto-encodeur

- ▶ idée: réseau de neurones représentant l'identité par un code intermédiaire de petite dimension, apprentissage non supervisé,
- ▶ deux parties: encodeur \mathcal{E}_{θ_e} et décodeur \mathcal{D}_{θ_d} ,
- ▶ entrée $u \in \mathbb{R}^{2N}$, code $\bar{u} = \mathcal{E}_{\theta_e}(u) \in \mathbb{R}^{2K}$ tel que $K \ll N$, $\hat{u} = \mathcal{D}_{\theta_d}(\bar{u})$ proche de u ,

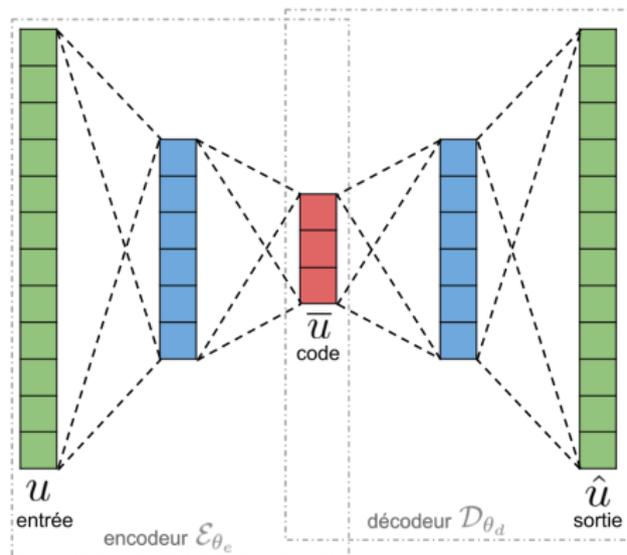


Figure: Auto-encodeur

Réduction par auto-encodeur

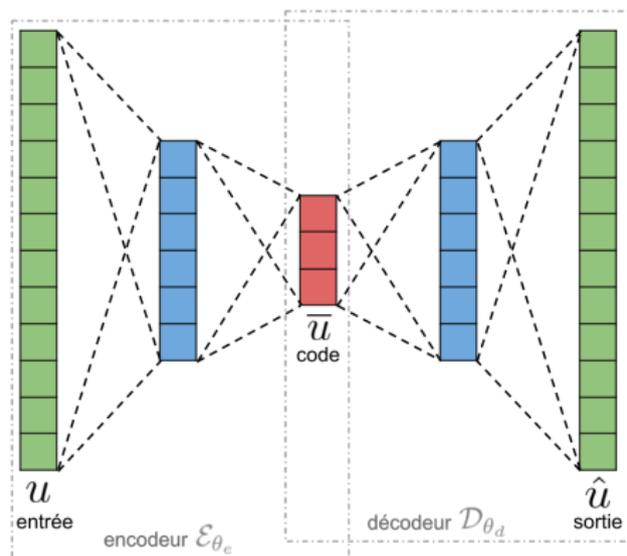


Figure: Auto-encodeur

- ▶ entraînement: $\mathcal{L}_{AE} = \|u - (\mathcal{D}_{\theta_d} \circ \mathcal{E}_{\theta_e})(u)\|^2$ i.e. $\mathcal{D}_{\theta_d} \circ \mathcal{E}_{\theta_e} \sim id$,
- ▶ hypothèse: \bar{u} suit une dynamique symplectique,
- ▶ MAIS ne fournit pas le modèle réduit.

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithmes PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ comment ? Par des couches denses de plus en plus petites,
- ▶ exemple:
 - ▶ $2N = 2000 \rightarrow 2K = 20$,
 - ▶ couches de l'encodeur: $1000 \rightarrow 500 \rightarrow 250 \rightarrow 20$,
 - ▶ couches du décodeur: $250 \rightarrow 500 \rightarrow 1000 \rightarrow 2000$,

- ▶ comment ? Par des couches denses de plus en plus petites,
- ▶ exemple:
 - ▶ $2N = 2000 \rightarrow 2K = 20$,
 - ▶ couches de l'encodeur: $1000 \rightarrow 500 \rightarrow 250 \rightarrow 20$,
 - ▶ couches du décodeur: $250 \rightarrow 500 \rightarrow 1000 \rightarrow 2000$,
 - ▶ encodeur: 2 631 770 paramètres,
 - ▶ décodeur: 2 633 750 paramètres.

Optimisation de l'architecture I

- ▶ problème: entrée en grande dimension $2N$: beaucoup (trop) de paramètres \rightarrow alléger l'architecture,
- ▶ idée: réduire le nombre de connexions entre les neurones de couches successives \rightarrow ne connecter que des paquets de neurones d'une couche à l'autre \rightarrow architecture légère:

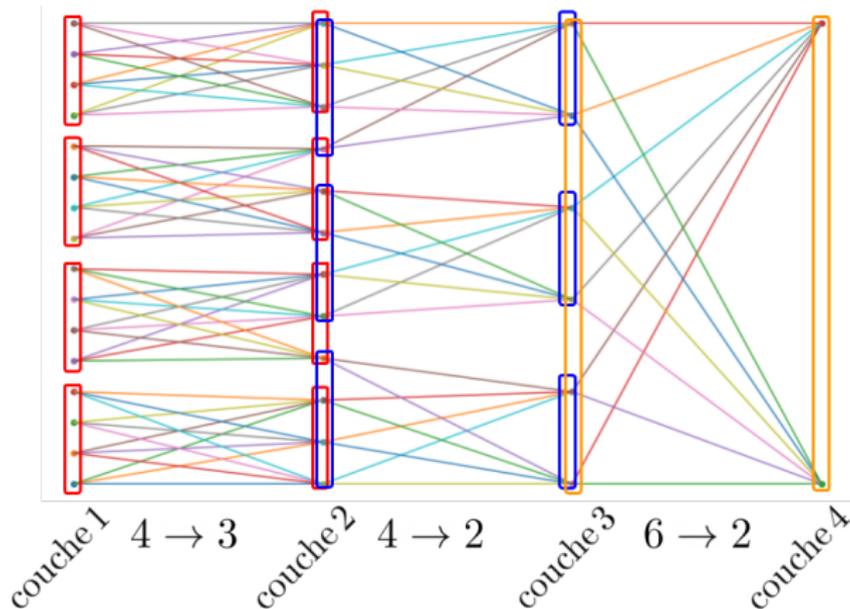


Figure: Exemple d'architecture légère (source: V. Vigon)

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne
Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques
Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ problème: structure de $u = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$ non prise en compte,
- ▶ idée: u composé de deux parties: utiliser deux réseaux \rightarrow structure séparée:
- ▶ deux encodeurs $\mathcal{E}_{\theta_e^x}, \mathcal{E}_{\theta_e^v} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^K$ tel que $\mathcal{E}_{\theta_e} := \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{\theta_e^x} \\ \mathcal{E}_{\theta_e^v} \end{pmatrix}$,
- ▶ deux décodeurs $\mathcal{D}_{\theta_d^x}, \mathcal{D}_{\theta_d^v} : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^N$ tel que $\mathcal{D}_{\theta_d} := \begin{pmatrix} \mathcal{D}_{\theta_d^x} \\ \mathcal{D}_{\theta_d^v} \end{pmatrix}$,
- ▶ pour la compression / décompression:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{\theta_e^x}^x(x) = \bar{x} \\ E_{\theta_e^v}^v(v) = \bar{v} \end{array} \right. \quad \left| \quad \left\{ \begin{array}{l} D_{\theta_d^x}^x(\bar{x}) = x \\ D_{\theta_d^v}^v(\bar{v}) = v \end{array} \right.$$

- ▶ problème: structure de $u = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$ non prise en compte,
- ▶ idée: $\dot{x} = v$: un réseau code x , on le dérive pour avoir v : \rightarrow structure monobloc,
- ▶ un encodeur \mathcal{E}_{θ_e} , un décodeur \mathcal{D}_{θ_d} tels que:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}_{\theta_e}(x) = \bar{x} \\ d_x \mathcal{E}_{\theta_e} v = \bar{v} \end{array} \right. \quad \Bigg| \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}_{\theta_d}(\bar{x}) = x \\ d_x \mathcal{D}_{\theta_d} \bar{v} = v \end{array} \right.$$

- ▶ 6 auto-encodeurs à tester: architecture dense ou légère + structure classique, séparée ou monobloc → on teste pour en choisir une,
- ▶ on les compare à performances équivalentes, sur des particules confinées avec un champ auto-consistant,

Optimisation de l'architecture III

	classique	séparé	monobloc
dense	AE	SAE	MAE
léger	LAE	SLAE	MLAE

► en poids:

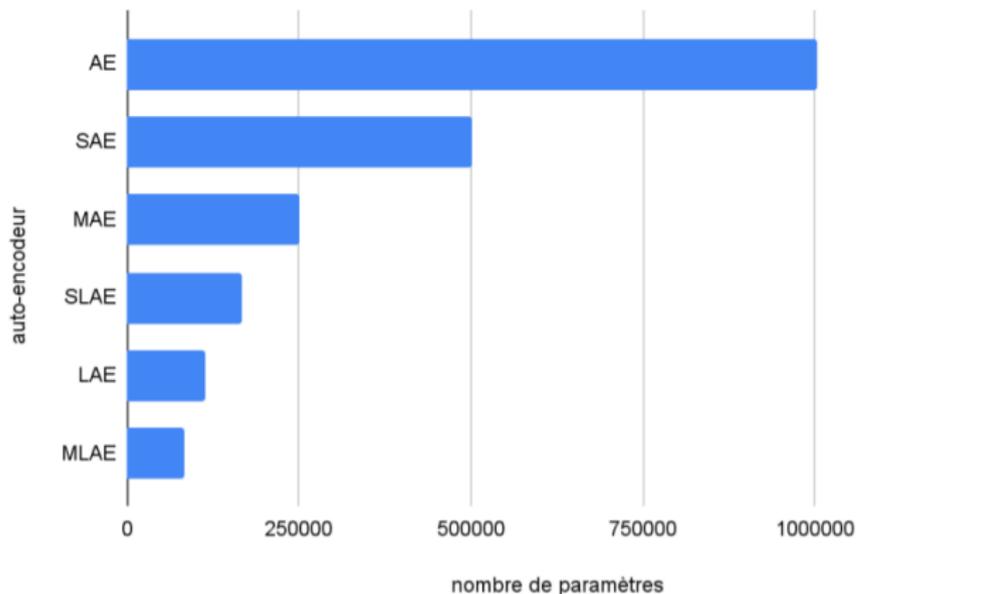


Figure: Nombre de paramètres par auto-encodeur

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Optimisation de l'architecture III

► en erreur L^2 :

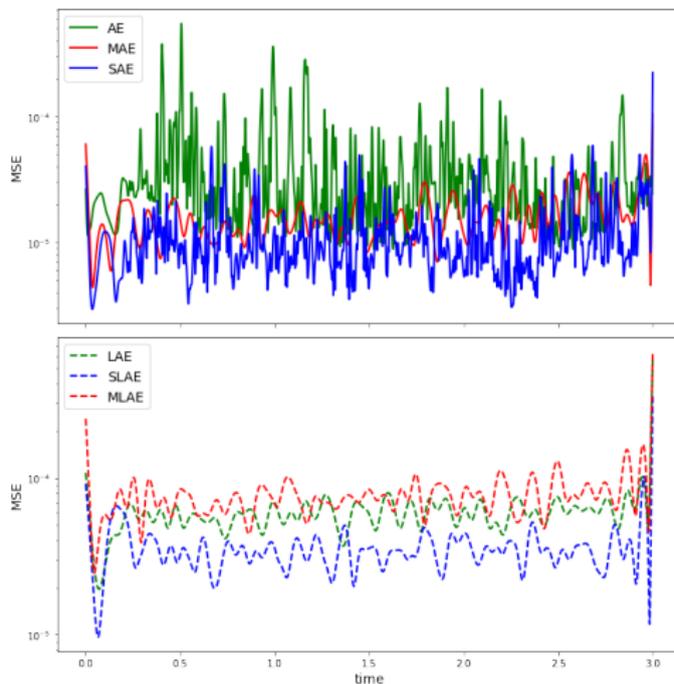


Figure: Erreur en fonction du temps par auto-encodeur

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Optimisation de l'architecture III

► en régularité des variables réduites:

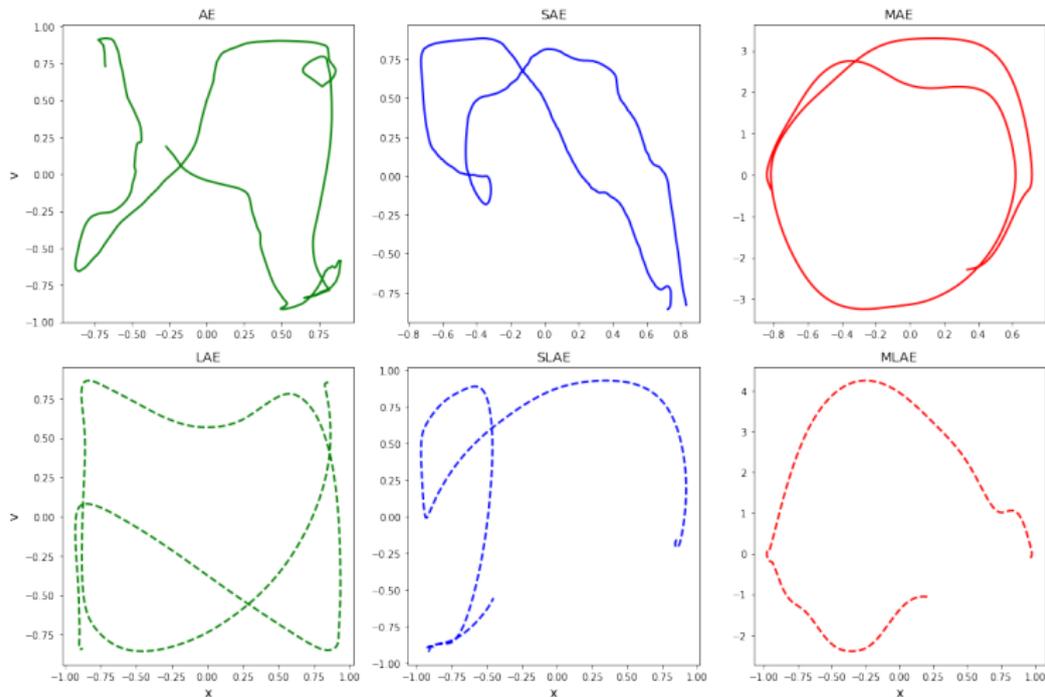


Figure: Trajectoire d'une particule réduite par auto-encodeur

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par l'algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ concernant les architectures:
 - ▶ dense: trop lourdes,
 - ▶ légère: meilleures variables réduites,
→ architecture légère
 - ▶ concernant les structures:
 - ▶ structures classiques: variables réduites médiocres,
 - ▶ structure monobloc: trop lente,
 - ▶ structure séparée: légère, efficace
- choix: auto-encodeur léger et séparé

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Réduction du
modèle de
Vlasov-Poisson
guidée par les
données

Guillaume Steimer

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ l'auto-encodeur ne donne pas le modèle réduit...
- ▶ comment modéliser la dynamique de \bar{u} ?
- ▶ idée: réseau de neurones \mathcal{F}_θ tel que:

$$\mathcal{F}_\theta(\bar{u}) \sim \dot{\bar{u}}$$

- ▶ sortie approchée par différences finies:

$$\dot{\bar{u}}_{\Delta t} \simeq \frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^{n-1}}{2\Delta t}$$

- ▶ dynamique calculée par schéma numérique (Euler, RK...),
- ▶ loss:

$$\mathcal{L}_{\text{modele}} = \|\dot{\bar{u}}_{\Delta t} - \mathcal{F}_\theta(\bar{u})\|_2^2$$

- ▶ illustration avec un simple système masse-ressort idéal:

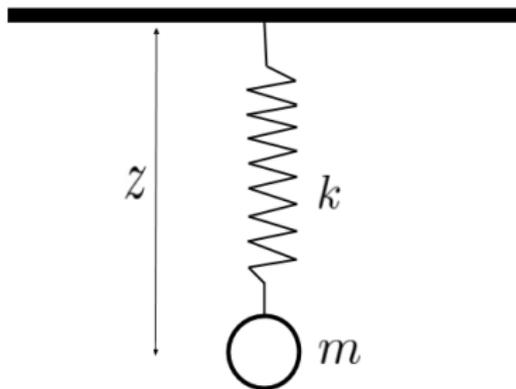


Figure: Système masse-ressort idéal

- ▶ position $q(t) = A \cos(\omega t)$, impulsion $p(t) = -A \sin(\omega t)$,
 $\omega^2 = k/m \rightarrow$ portrait de phase = cercle,
- ▶ on entraîne \mathcal{F}_θ et on teste,

Modélisation de la dynamique réduite

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

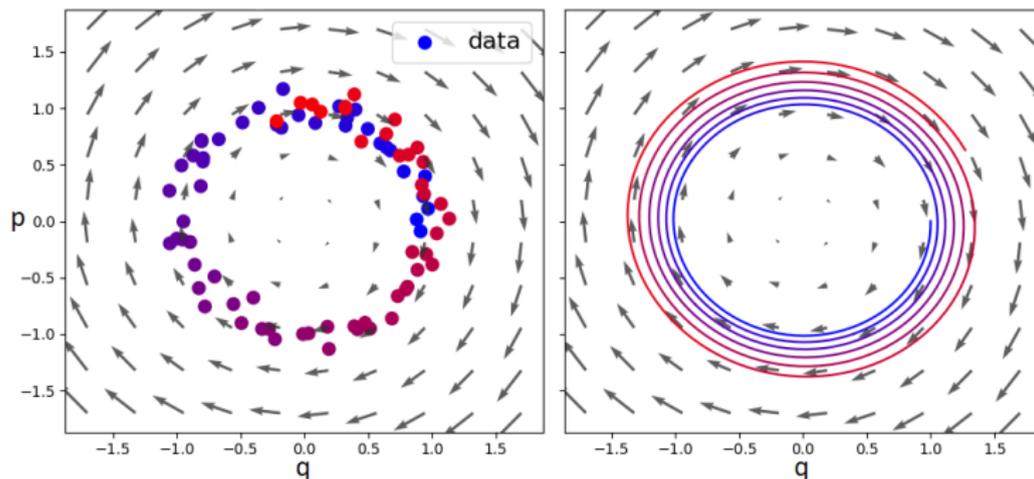


Figure: Données (gauche) et prédiction de \mathcal{F}_θ (droite)

► ça ne marche pas $\rightarrow \mathcal{F}_\theta$ ne préserve pas l'hamiltonien !

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne
Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques
Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur
Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Modélisation de la dynamique réduite

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

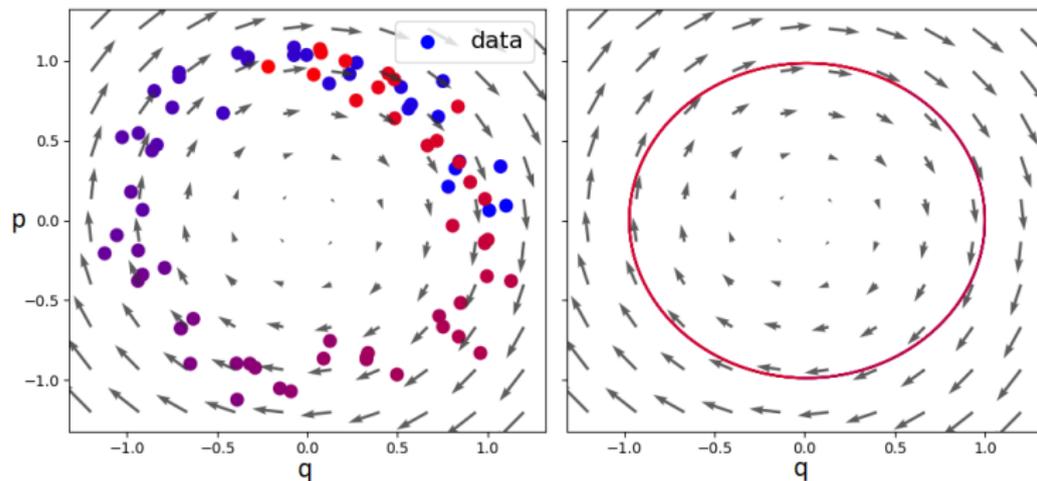


Figure: Données (gauche) et prédiction de \mathcal{H}_θ (droite)

► ça marche ! \mathcal{H}_θ préserve l'hamiltonien.

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ dans notre cas:
 - ▶ l'entrée \bar{u} est donnée par l'encodeur, sortie décompressée par le décodeur,
 - ▶ l'hamiltonien est séparé:

$$\mathcal{H}_\theta(\bar{u}) = \mathcal{H}_{\theta\bar{x}}(\bar{x}) + \mathcal{H}_{\theta\bar{v}}(\bar{v}),$$

- ▶ loss:

$$\mathcal{L}_{HNN} = \left\| \nabla_{\bar{v}} \mathcal{H}_{\theta\bar{v}}(\bar{v}(t)) - \dot{\bar{x}}_{\Delta t} \right\|_2^2 + \left\| \nabla_{\bar{x}} \mathcal{H}_{\theta\bar{x}}(\bar{x}(t)) + \dot{\bar{v}}_{\Delta t} \right\|_2^2$$

- ▶ dynamique calculée par schéma de Störmer-Verlet,
- ▶ modèle réduit symplectique: stabilité,
- ▶ on le teste couplé à un auto-encodeur entraîné, sur des particules confinées en champ auto-consistant.

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discretisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Modélisation de la dynamique réduite

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

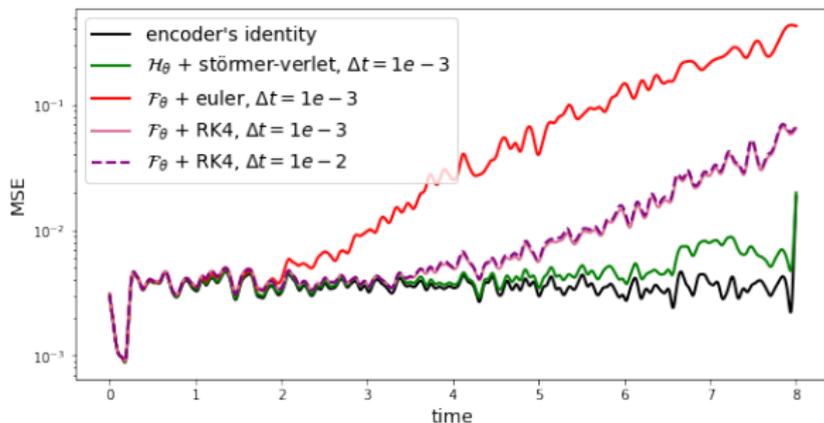


Figure: Erreurs L^2 des prédictions de \mathcal{H}_θ avec différents schémas numériques

► ça marche !

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ phase hors ligne (coûteuse, lente):
 - ▶ génération d'une base de données par PIC,
 - ▶ entraînement auto-encodeur et réseau hamiltonien,
- ▶ phase en ligne (rapide):
 - ▶ compression des conditions initiales par encodeur,
 - ▶ simulation du modèle réduit par réseau hamiltonien,
 - ▶ décompression des conditions finales ou autre sortie d'intérêt par décodeur.

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Réduction du
modèle de
Vlasov-Poisson
guidée par les
données

Guillaume Steimer

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ $N = 1000, K = 7$ (ratio ~ 140),
- ▶ conditions initiales: distribution normal en vitesse et bêta $\mathcal{B}(\alpha, \beta)$ en position, $\beta = 1.5$ fixe,
- ▶ paramètre de réduction: $\alpha \in \{2.2, 2.6, 3.0, 3.4, 3.8\}$,
- ▶ trajectoire d'une particule:

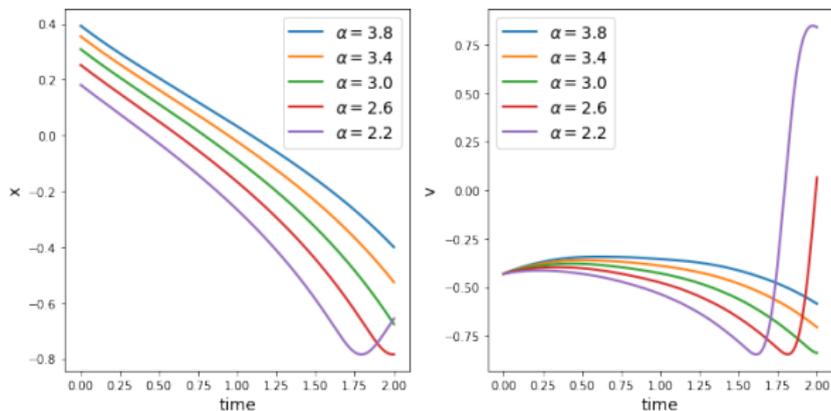
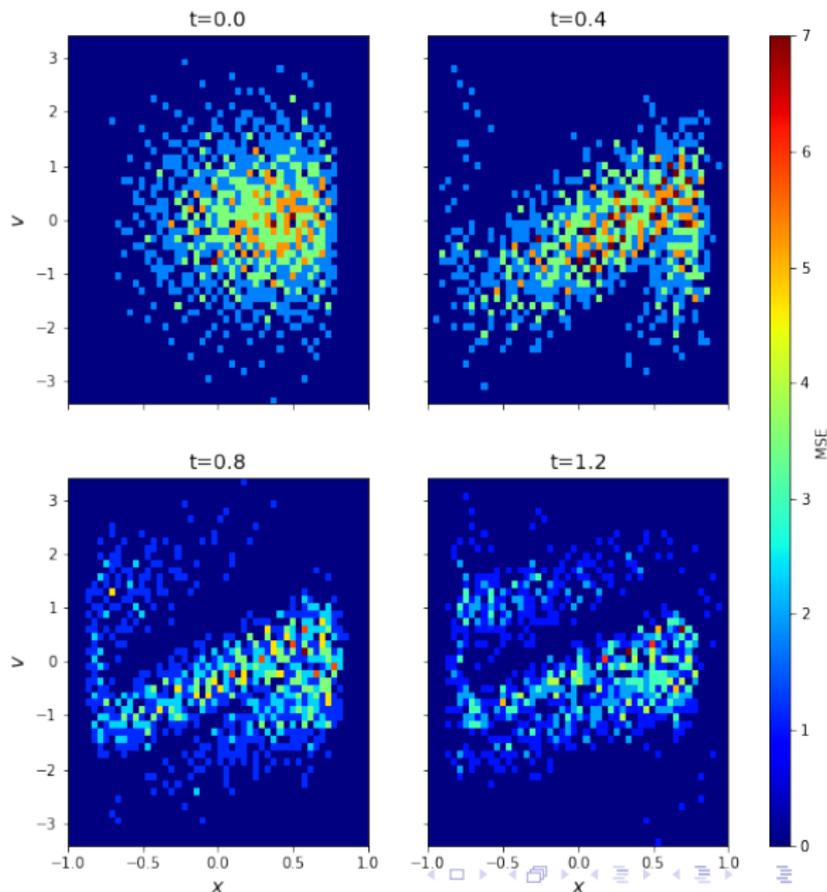


Figure: position (gauche) et vitesse (droite) en fonction du temps

Résultats

► évolution de f :



Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne
Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques
Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur
Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Résultats

- ▶ processus 25 fois plus rapide,
- ▶ quelques erreurs en fonction du temps:

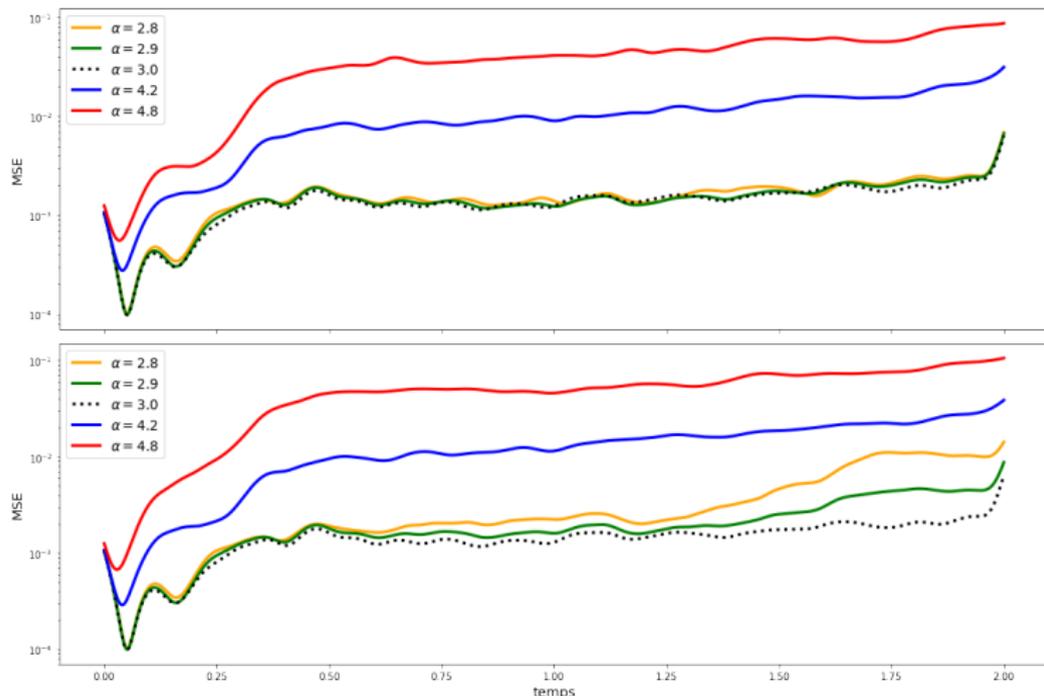


Figure: MSE en fonction du temps pour l'identité de l'auto-encodeur (haut) et la prédiction du réseau hamiltonien (bas)

Réduction du modèle de Vlasov-Poisson guidée par les données

Guillaume Steimer

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

► erreur en fonction de α :

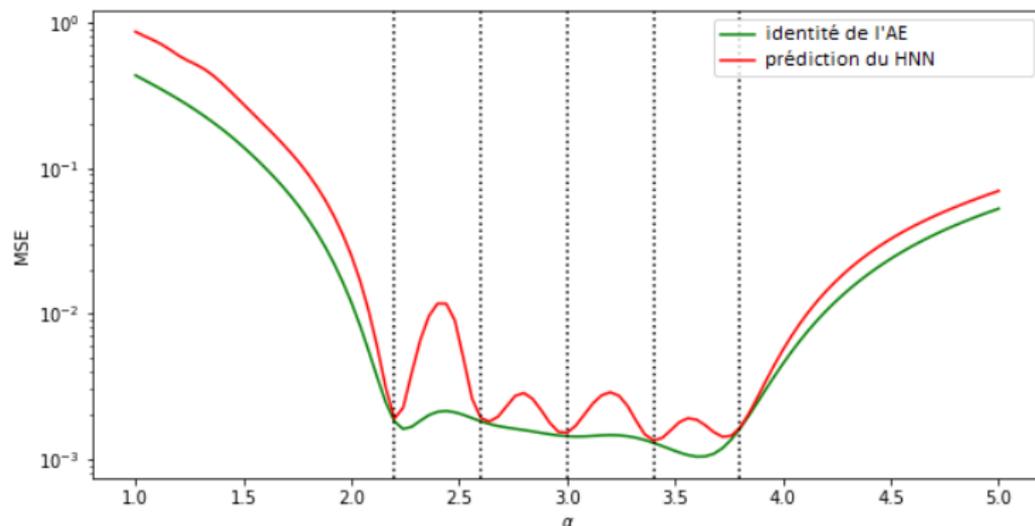


Figure: MSE en fonction de α pour l'identité de l'auto-encodeur (vert) et la prédiction du réseau hamiltonien (rouge)

Modéliser un plasma

Le plasma
Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par l'algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne
Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques
Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur
Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de Vlasov-Poisson et discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes classiques

Réduction par apprentissage d'un auto-encodeur

Optimisation de l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

Modéliser un plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des données par algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References

- ▶ atouts: processus efficace, accélération par rapport à PIC, grand ratio de réduction (jusqu'à 700), stable en temps long, scalabilité, paramétrisation,
- ▶ faiblesses: construction de l'architecture légère, permutations des particules, domaine périodique,
- ▶ travail en cours sur ce sujet: plus de paramètres de réduction, obtenir l'invariance par permutation...

- [1] Régine Barthelmé. “Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de Vlasov et de Maxwell.”. Thèse. 7, rue René Descartes 67084 Strasbourg Cedex (FRANCE): Université Louis Pasteur et CNRS (UMR 7501), 2005.
- [2] Sam Grehdanus, Misko Dzamba, and Jason Yosinski. *Hamiltonian Neural Networks*. <https://grehdanus.github.io/2019/05/15/hamiltonian-nns/>.
- [3] Eric Sonnendrücker. *Numerical Methods for the Vlasov-Maxwell equations*. Springer, 2015.
- [4] Tomasz M. Tyranowski and Michael Kraus. “Symplectic model reduction methods for the Vlasov equation”. In: (2019). arXiv: 1910.06026 [physics.comp-ph].

Merci de votre attention!

Modéliser un
plasma

Le plasma

Équation de
Vlasov-Poisson et
discrétisation

Génération des
données par
algorithme PIC

Notions de mécanique
hamiltonienne

Algorithme PIC

Réduction du
modèle

Limite des méthodes
classiques

Réduction par
apprentissage d'un
auto-encodeur

Optimisation de
l'architecture

Modélisation de la
dynamique réduite

Résultats

Conclusion

References