

Apprentissage de fonctions d'énergie via PINN

Application au traitement des eaux usées

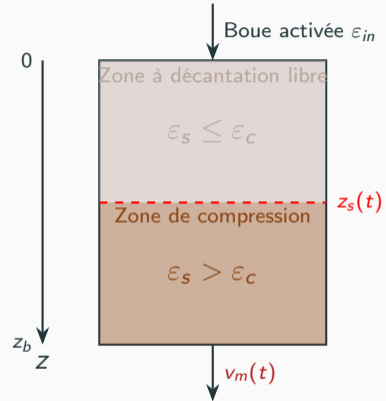
M. Bajodek C. Valentin J. Peralez H. Megdoul*

LAGEPP — Laboratoire d'Automatique, de Génie des Procédés et de Génie Pharmaceutique



* Ce travail a bénéficié d'une aide de l'État gérée par l'Agence Nationale de la Recherche au titre de France 2030 portant la référence ANR-21-SFRI-0001

Procédé complet : Sédimentation



Objectif de commande : Digitalisation des processus de pilotage

Maintenir l'interface $z_s(t)$ à une consigne z_s^* via la vitesse de pompe $v_m(t)$.

Modèle non linéaire : Bilan de conservation²

Le système est constitué de **deux EDPs hyperboliques non linéaires** :

$$\begin{cases} \partial_t \varepsilon_s + \partial_z f_s = 0, & \forall z \in \Omega = (0, z_b) \\ \partial_t f_s + \partial_z \left(\frac{f_s^2}{\varepsilon_s} + \sigma_e(\varepsilon_s) \right) = K \varepsilon_s + \mathcal{R}(\varepsilon_s) (\varepsilon_s v_m(t) - f_s) \end{cases} \quad \text{(EDP hyperbolique)}$$
$$\begin{cases} \varepsilon_s(0) = \varepsilon_{in}, & f_s(0) = \left(\frac{K}{\gamma} + v_m(t) \right) \varepsilon_{in} \\ f_s(z_b) = \varepsilon_s(z_b) v_m(t) \end{cases} \quad \text{(CB Dirichlet)}$$

Les lois constitutives dépendent du seuil critique $\varepsilon_c \in (0, 1) \Rightarrow$ **interface mobile $z_s(t)$**

Contrainte effective inter-particules

$$\sigma_e(\varepsilon_s) = 0 \quad \text{si } \varepsilon_s \leq \varepsilon_c$$

$$\sigma_e'(\varepsilon_s) > 0 \quad \text{si } \varepsilon_s > \varepsilon_c$$

Traînée liée aux frottements visqueux

$$\mathcal{R}(\varepsilon_s) = \gamma \quad \text{si } \varepsilon_s \leq \varepsilon_c$$

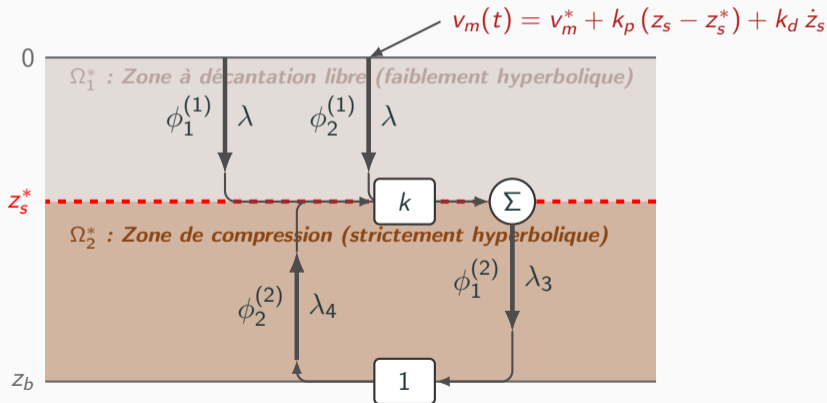
$$\mathcal{R}'(\varepsilon_s) > 0 \quad \text{si } \varepsilon_s > \varepsilon_c$$

2. AMIRAT et al., "Stability analysis of a class of 2×2 triangular hyperbolic systems".

Modèle linéarisé : Schématisation

Travail sur un domaine fixe $\Omega_1^* = (0, z_s^*)$ et $\Omega_2^* = (z_s^*, z_b)$.

Diagonalisation via invariants de Riemann $\phi_1^{(i)} = M_i \begin{bmatrix} \tilde{\epsilon}_s^{(i)} \\ \tilde{f}_s^{(i)} \end{bmatrix}$.



Stabilité en Dimension Infinie : Fonction d'énergie

Formalisme de Datko³ pour un système linéaire $\dot{\phi} = \mathcal{A}\phi$ dans un espace de Hilbert \mathcal{H} :

Équation de Lyapunov opérationnelle

$$\langle \mathcal{A}\phi, \mathcal{P}\phi \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \mathcal{P}\phi, \mathcal{A}\phi \rangle_{\mathcal{H}} = -\langle \phi, \mathcal{Q}\phi \rangle_{\mathcal{H}} \quad (*)$$

- \mathcal{Q} est un opérateur défini positif (typiquement $\mathcal{Q} = 2\mu\mathcal{P} + \mathcal{I}$).
- La fonctionnelle de Lyapunov est $V(\phi) = \langle \phi, \mathcal{P}\phi \rangle_{\mathcal{H}}$.
- **Stabilité exponentielle** \Leftrightarrow existence d'un tel \mathcal{P} vérifiant (*).

Objectif PINN

Paramétrer le **noyau** de l'opérateur intégral d'énergie \mathcal{P} par un réseau de neurones en **minimisant le résidu** de (*) sur $\Omega \times \Omega$ et $\partial\Omega \times \partial\Omega$.

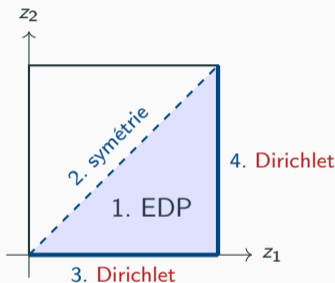
3. DATKO, "Extending a theorem of A. M. Liapunov to Hilbert space".

Objectif : Résoudre les équations du noyau de l'opérateur énergie

Les noyaux $(P_1^{(i)}, P_2^{(i)}, P_3^{(i)})$ donnent l'énergie

$$\begin{aligned} V(\phi^{(i)}) &= \iint P_1^{(i)}(z_1, z_2) \phi_1^{(i)}(z_1) \phi_1^{(i)}(z_2) dz_1 dz_2 \\ &+ \iint P_2^{(i)}(z_1, z_2) \phi_2^{(i)}(z_1) \phi_2^{(i)}(z_2) dz_1 dz_2 \\ &+ \iint P_3^{(i)}(z_1, z_2) \phi_1^{(i)}(z_1) \phi_2^{(i)}(z_2) dz_1 dz_2 \end{aligned}$$

et satisfont les contraintes



Stratégie PINN

Six réseaux de neurones sont entraînés en minimisant les quatre résidus.

Problématique : Apprendre l'Opérateur de Lyapunov par PINN

Comment construire un PINN \mathcal{P}_θ qui apprend \mathcal{P} — et garantit réellement la stabilité ?

1. Géométrie triangulaire

Définir le noyau sur le **triangle**

$\{(z_1, z_2) \mid 0 \leq z_2 \leq z_1 \leq z_b\}$.

2. Conditions aux bords (CB)

Gérer des CB de Dirichlet bouclées dans la structure du réseau de neurones.

3. Résultat constructif de stabilité

Certifier que \mathcal{P}_θ appris vérifie

$V = \langle \phi, \mathcal{P}_\theta \phi \rangle > 0$ et $\dot{V} < 0$

4. Le cas de la singularité $\mathcal{P} \rightarrow \infty$

Gérer les cas où la condition de Lyapunov n'est pas respectée.

Solution proposée

Stage de M2 de H. Megdoul (5 mois GI EIF, 1 mois LAGEPP)

On étudie d'abord un cas scalaire simplifié :

$$\begin{cases} \partial_t \phi(t, x) + \lambda(x) \partial_x \phi(t, x) = 0, & t > 0, x \in [0, 1], \\ \phi(t, 0) = k \phi(t, 1), & t > 0, \end{cases} \quad (1)$$

avec $\lambda(x) > 0$ et $k \in \mathbb{R}$.

Objectif : construire une fonctionnelle d'énergie

$$V(\phi) = \int_0^1 \int_0^1 \phi(x_1) P(x_1, x_2) \phi(x_2) dx_1 dx_2$$

à partir d'un noyau symétrique définie positive $P(x_1, x_2)$.

Condition de stabilité :

Le système (1) **GES à la vitesse** $\mu > 0$ $\iff \dot{V}(t) < -\mu V(t), \quad \forall \phi \in C_{pm}^1(\mathbb{R}_+^*, [0, 1])$

$$\iff \dot{V}(t) = -\mu V(t) - \int_0^1 \int_0^1 \phi(t, x_1) Q(x_1, x_2) \phi(t, x_2) dx_1 dx_2 \quad \text{avec } Q > 0$$

$$\iff \begin{cases} \partial_{x_1} (\lambda(x_1)P(x_1, x_2)) + \partial_{x_2} (\lambda(x_2)P(x_1, x_2)) + \mu P(x_1, x_2) + Q(x_1, x_2) = 0, \\ P(1, x) = \frac{\lambda(0)}{\lambda(1)} P(x, 0)k. \end{cases}$$

Cas particulier : le cas où $\lambda(x) = \lambda$ et $Q(x_1, x_2) = \exp\left(-\frac{(x_1-x_2)^2}{2\sigma^2}\right)$

Dans ce cadre, le noyau $P_{exact}(x_1, x_2)$ admet une expression explicite :

$$P_{exact}(x_1, x_2) = e^{-\frac{\mu}{2\lambda}(x_1+x_2)} P_{exact}(x_1 - x_2, 0) - I(x_1, x_2),$$

Avec

$$I(x_1, x_2) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{(x_1-x_2)^2}{2\sigma^2}} \left(1 - e^{-\frac{\mu}{2\lambda}(x_1+x_2)}\right)$$

Et

$$P_{exact}(x_1 - x_2, 0) = \frac{1}{1 - k^2 e^{\mu/\lambda}} \left(G(1 - x_1 + x_2) + k e^{\mu/2\lambda} G(x_1 - x_2) \right).$$

Où

$$G(x) = e^{\frac{\mu}{2\lambda}(1+x)} (I(1, x) - k I(x, 0)).$$

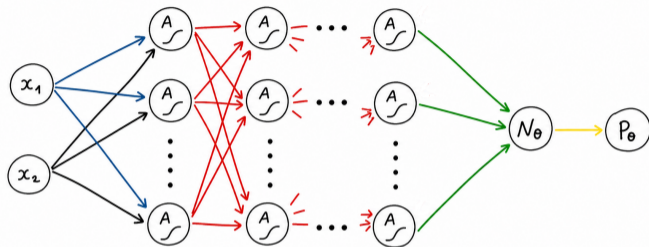
Pourquoi cette solution analytique est importante ?

Un outil de validation du PINN

Cette solution analytique sert ensuite de référence pour évaluer l'approche PINN :

- comparer la solution apprise à la solution exacte
- mesurer la qualité de l'approximation
- vérifier les propriétés importantes : symétrie, positivité et conditions aux bords

Architecture du réseau PINN



Fonction d'activation utilisée dans les couches cachées :

$$\text{SiLU}(x) = \frac{x}{1 + e^{-x}}.$$

Avec $P_\theta(x_1, x_2) = N_\theta(x_1, x_2) + kx_1(1 - x_1)(1 - x_2)N_\theta(x_2, 0) + k^2x_1x_2N_\theta(0, 0)$ si $x_1 > x_2$
sinon, $P_\theta(x_1, x_2) = P_\theta(x_2, x_1)$

Cette construction impose donc la symétrie de P_θ et garantit le respect des conditions au bord.

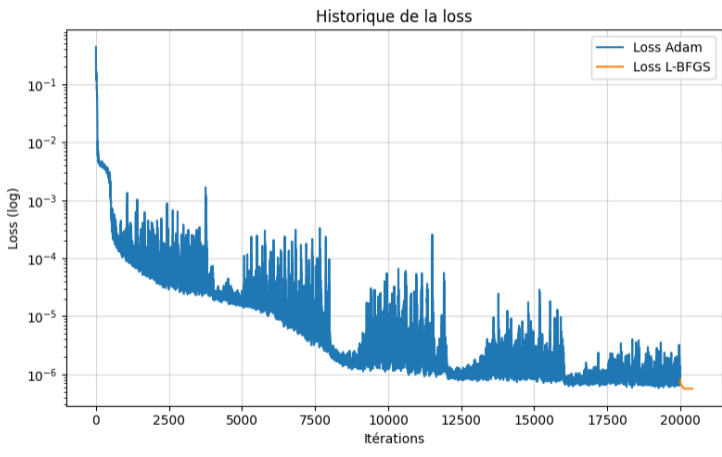
Résidu EDP

$$\mathcal{R}_\theta = \lambda(\partial_{x_1} P_\theta + \partial_{x_2} P_\theta) + \mu P_\theta + Q(x_1, x_2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \frac{1}{N_f} \sum |\mathcal{R}_\theta|^2$$

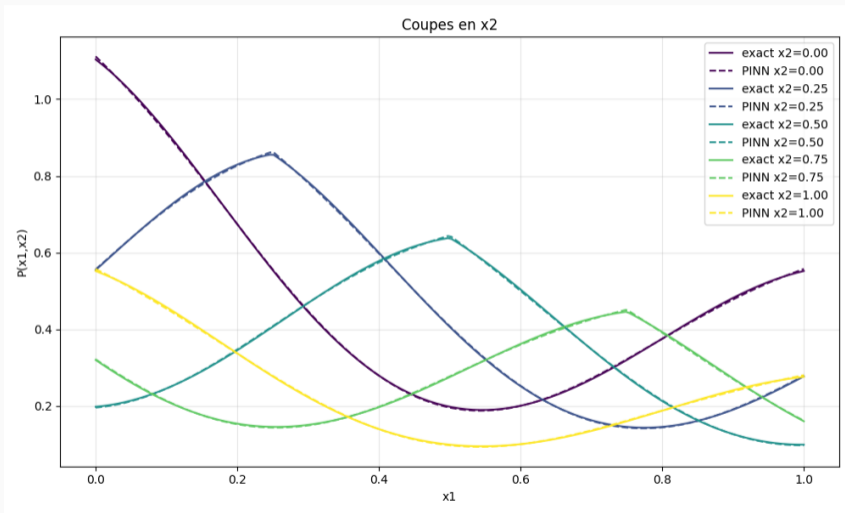
Entraînement et convergence

Paramètres fixés : $N_f = 1000$, $LR = 2 \times 10^{-3}$, $\lambda = 2$, $k = 0.5$ et $\sigma = 0.3$.

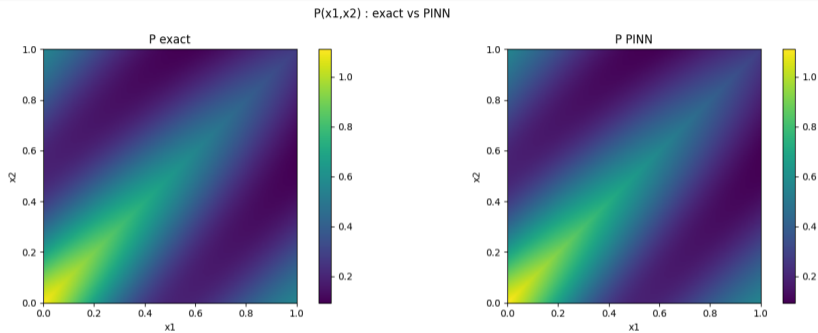


loss finale $\mathcal{L}_{\text{PDE}} \simeq 4.3 \times 10^{-7}$.

Coupes du noyau $P(x_1, x_2)$ pour différents x_2



Résultats : qualité de l'approximation



- Les cartes P_{exact} et P_{θ} sont très proches sur tout le carré $[0, 1]^2$.
- La symétrie par rapport à la diagonale $x_1 = x_2$ est bien reproduite.

Principe

On discrétise le noyau $P_\theta(x_1, x_2)$ sur une grille, puis on calcule les valeurs propres de la matrice obtenue.

Résultat

$$\lambda_{\min}(P_\theta) \approx 10^{-5}, \quad \lambda_{\max}(P_\theta) \approx 77.2$$

Toutes les valeurs propres calculées sont positives.

Résultat principal

P_θ est bien un noyau d'énergie (numériquement symétrique et strictement positif).

Perspectives

- Étendre l'étude à des cas plus généraux, en augmentant le nombre de variables d'entrée du réseau, par exemple k et λ .
- Étudier le comportement du réseau au voisinage de la singularité.

Merci pour votre attention