

Problème Inverse : Transfert Radiatif et Apprentissage

Roussel Desmond NZOYEM

Université de Strasbourg
UFR de mathématiques et d'informatique
Master 1 CSMI

August 25, 2020

Simulation 2D de l'équation du transfert radiatif et reconstruction de la densité par un réseau de neurones

Roussel Desmond NZOYEM

Enseignant referent
Christophe PRUD'HOMME

Maitre de stage
Emmanuel FRANCK
Laurent NAVORET
Vincent VIGON

Annee Academique 2019/2020

L'équipe MOCO compte plusieurs membres parmi lesquels MM.:

- Emmanuel FRANCK
- Laurent NAVORET

Responsables des séminaires en EDP

L'équipe MOCO compte plusieurs membres parmi lesquels MM.:

- Emmanuel FRANCK
- Laurent NAVORET

Responsables des séminaires en EDP

- Partenariats internationaux (Portugal, Allemagne, USA, etc.)
- Partenariats industriels
- Modélisation des plasmas

L'équipe Probabilités compte plusieurs membres parmi lesquels
M.:

■ Vincent VIGON

L'équipe Probabilités compte plusieurs membres parmi lesquels M.:

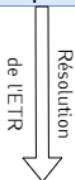
- Vincent VIGON

Des activités diverses:

- Partenariats internationaux (Allemagne, Australie, Chine, etc)
- Séminaire (de calcul) stochastique.

Probleme direct
(Resolution de l'EDP du transfert radiatif)

Densité, opacités, etc.

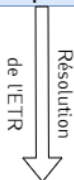


Signaux sur les bords du domaine

Probleme direct

(Resolution de l'EDP du transfer radiatif)

Densité, opacités, etc.

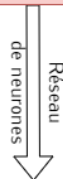


Signaux sur les bords du domaine

Probleme inverse

(Reconstruction de la densite par un ANN)

Signaux sur les bords du domaine



Densité

Trois point clés pour situer le stage:

- 1 Explosion du deep learning
- 2 Applications dans le secteur medical (Imagerie medicale)
- 3 Reevaluation des methode de resolution de problemes inverse

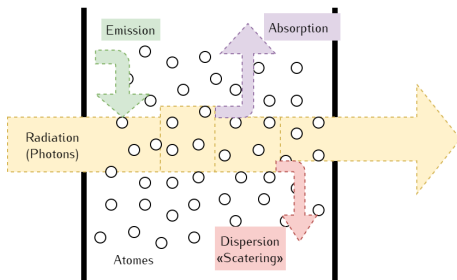
Sommaire

- 1 Introduction
 - L'IRMA
 - Le sujet du stage
- 2 Principe
 - Simulation de l'ETR
 - Réseau de neurones
- 3 Le problème en 1D
 - Simulation
 - Apprentissage
- 4 Le problème en 2D
 - Simulation
 - Apprentissage
- 5 Conclusion
 - Sur l'apprentissage
 - Generale

Le transfer radiatif

Lorsque la photons se trouvent en presence de la matiere, Trois phenomènes majeures (caratisees par leurs opacites) se produisent:

- Emission (σ_e): Plus la temperature matiere est elevee, plus l'emission est importante
- Absorption (σ_a): Lorsqu'on est a l'equilibre thermique, $\sigma_a = \sigma_e$
- Scattering (σ_c): Il faut aussi tenir compte de la fonction de distribution angulaire de "scattering" $p(\Omega' \rightarrow \Omega)$ (Turpault, 2004).



Interaction entre matière et radiation

L'ETR

L'équation du transfert radiatif est bilan d'énergie lié au rayonnement au niveau mésoscopique.

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) \\ = \sigma_a(\rho, \boldsymbol{\Omega}, \nu) (B(\nu, T) - I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)) \\ + \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{S^2} \sigma_c(\rho, \boldsymbol{\Omega}, \nu) p(\boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) (I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}', \nu) - I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)) d\boldsymbol{\Omega}' d\nu \end{aligned}$$

Où

- $I(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)$ désigne l'intensité radiative spécifique;
- $B(\nu, T)$ la fonction de Planck;
- $\oint p(\boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}' = 1$

Le modele P1

D'apres (Franck, 2012)

$$\begin{cases} \partial_t E + c \operatorname{div} F = c\sigma_a (aT^4 - E) \\ \partial_t F + c \nabla E = -c\sigma_c F \\ \rho C_v \partial_t T = c\sigma_a (E - aT^4) \end{cases}$$

Ou:

$$E(t, x) = \frac{4\pi}{c} \int_0^\infty \int_{S^2} I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu$$

$$F(t, x) = \frac{4\pi}{c} \int_0^\infty \int_{S^2} \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu$$

Le schema de jj splitting \mathcal{L} : Etape 1

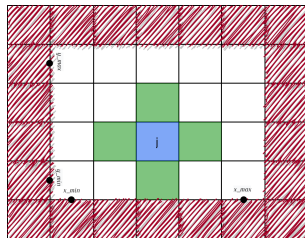
A l'iteration n , On pose $\Theta = aT^4$

$$\begin{cases} E_j^{q+1} = \frac{\alpha E_j^n + \beta \gamma \Theta_j^n}{1 - \beta \delta} \\ \Theta_j^{q+1} = \frac{\gamma \Theta_j^n + \alpha \delta E_j^n}{1 - \beta \delta} \end{cases}$$

Ou $\mu_q = \frac{1}{T^{3,n} + T^n T^{2,q} + T^q T^{2,n} + T^{3,q}}$

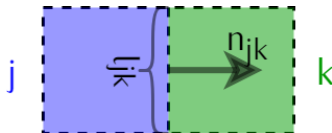
$$\alpha = \frac{1}{\Delta t \left(\frac{1}{\Delta t} + c\sigma_a \right)}, \quad \beta = \frac{c\sigma_a}{\frac{1}{\Delta t} + c\sigma_a}, \quad \gamma = \frac{\rho_j C_V \mu_q}{\Delta t \left(\frac{\rho_j C_V \mu_q}{\Delta t} + c\sigma_a \right)} \quad \text{et} \quad \delta = \frac{c\sigma_a}{\frac{\rho_j C_V \mu_q}{\Delta t} + c\sigma_a}.$$

Convergence vers E_j^* et Θ_j^* . F_j reste constant egale a F_j^* .



Le schema de jj splitting \mathcal{L} : Etape 2

$$\begin{cases} E_j^{n+1} = E_j^* + \alpha \sum_k (F_{jk}, n_{jk}) \\ F_j^{n+1} = \beta F_j^* + \gamma E_j^n + \delta \sum_k E_{jk} n_{jk} \end{cases}$$



Avec :

$$\alpha = -\frac{c\Delta t}{|\Omega_j|},$$

$$\beta = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{\Delta t} + c \sum_k M_{jk} \sigma_{jk} \right)^{-1},$$

$$\gamma = \frac{c}{|\Omega_j|} \left(\frac{1}{\Delta t} + c \sum_k M_{jk} \sigma_{jk} \right)^{-1} \left(\sum_k l_{jk} M_{jk} n_{jk} \right)$$

$$\delta = -\frac{c}{|\Omega_j|} \left(\frac{1}{\Delta t} + c \sum_k M_{jk} \sigma_{jk} \right)^{-1}$$

$$(F_{jk}, n_{jk}) = l_{jk} M_{jk} \left(\frac{F_j^n \cdot n_{jk} + F_k^n \cdot n_{jk}}{2} - \frac{E_k^n - E_j^n}{2} \right)$$

$$E_{jk} n_{jk} = l_{jk} M_{jk} \left(\frac{E_j^n + E_k^n}{2} - \frac{F_k^n \cdot n_{jk} - F_j^n \cdot n_{jk}}{2} \right) n_{jk}$$

$$M_{jk} = \frac{2}{2 + \Delta x \sigma_{jk}}$$

$$\sigma_{jk} = \frac{1}{2} \left(\sigma_c(\rho_j, T_j^n) + \sigma_c(\rho_k, T_k^n) \right)$$

Implementation C++

- Temps final = 0.01 sh
- $c = 299$ [cm/sh]
- $a = 0.01372$ [g/cm/sh²/keV]
- $C_v = 0.14361$ [Jerk/g/keV]
- La densité ρ est un signal créneau [g cm⁻³]
- $\sigma_a = \rho T$ [cm⁻¹]
- $\sigma_c = \rho T$ [cm⁻¹]
- $T_0, T_{gauche} = 5$ [keV]
- $E_0 = aT_0^4$ [g/cm/sh²]
- $E_{gauche*} = aT_0^4 + 5 \sin(2k\pi t)$ [g/cm/sh²]
- $F_0, F_{gauche} = 0$ [g/sh²]
- Sorties libres sur les autres bords

```
x_min 0
x_max 1
y_min 0
y_max 1
N 90

c 299
a 0.01372
C_v 0.14361

CFL 0.5
precision 1e-6
t_0 0
t_f 0.01

rho crenau(0.5,0.5,0.1,10)
sigma_a rho*T
sigma_c rho*T

E_0 0.01372*(5^4)
F_0_x 0
F_0_y 0
T_0 5

E_u neu mann
F_u_x neu mann
F_u_y neu mann
T_u neu mann

E_d neu mann
F_d_x neu mann
F_d_y neu mann
T_d neu mann

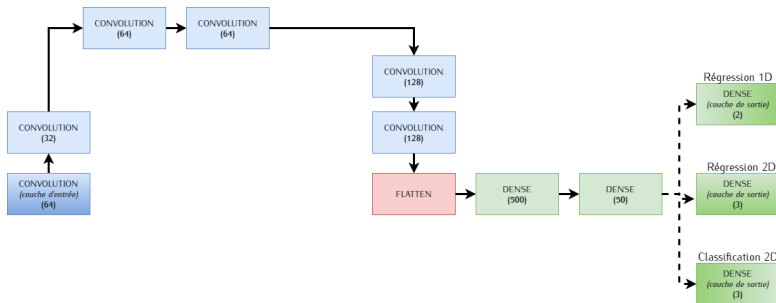
E_l punctuel(0.4,0.6)
F_l_x 0
F_l_y 0
T_l 5

E_r neu mann
F_r_x neu mann
F_r_y neu mann
T_r neu mann

export_file data/df_simu.csv
export_node dataframe
write_mode truncate
```

Exemple de configuration

L'architecture sous Keras

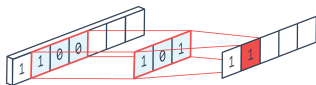


Architecture generale utilisee

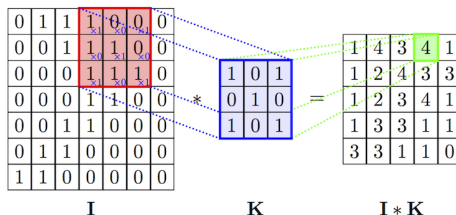
Les couches utilisees: Convolutions (Cross-correlation)

$$S(i, j) = (I * K)(i, j) = \sum_m \sum_n I(i+m, j+n) K(m, n)$$

$$S(i) = (I * K)(i) = \sum_m I(i+m) K(m)$$

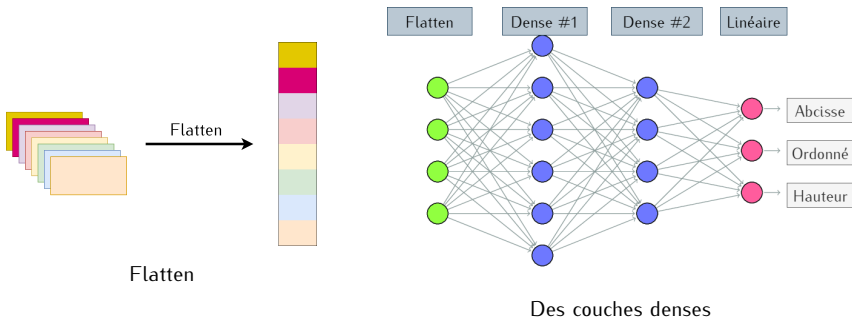


En 1D (Ganesh, 2019)



En 2D (Packt, s.d)

Les couches utilisees: Flatten et Dense



Les metriques

Coefficient de determination

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$$

Avec

$$SS_{res} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

Ou $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i$ représente la moyenne des valeurs observées.

Score personlise

Pourcentage des prédiction correcte si la prediction et le label sont suffsament proche:

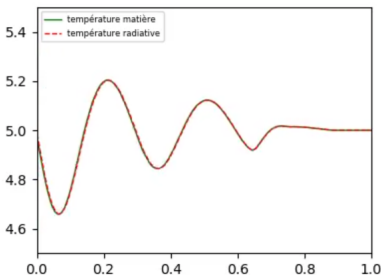
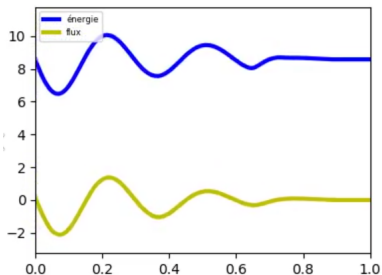
- **au dixième près** pour la position (suivant x ou y)
- **à l'unité près** pour la hauteur

Les hyper-paramètres

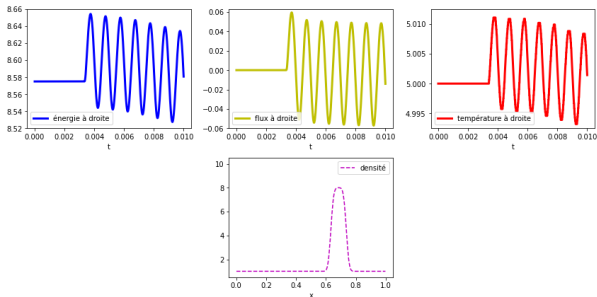
Liste des paramètres les plus influents pour l'entraînement

| Hyper-paramètre | Définition | Valeur 1D / 2D |
|-----------------|-----------------------------------|-----------------------|
| optimizer | algorithme d'optimisation | Adam |
| learning rate | taux d'apprentissage | 1e-4 / 1e-5 |
| batch size | taille d'un batch a chaque epoque | 32 |
| epochs | nombre d'époques | 100 |
| patience | patience pour l'early stopping | 10 |
| kernel size | taille du noyau de convolution | 3 / (6,2) |
| activation | type de fonction d'activation | relu, linear, sigmoid |

Exemple de simulation 1D



Entree sortie 1D



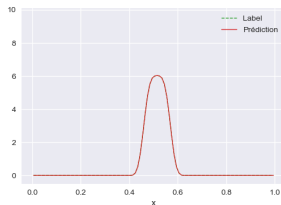
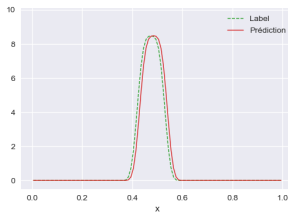
(50, 3)

Dimension temporelle Nombre de canaux

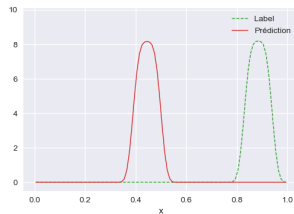
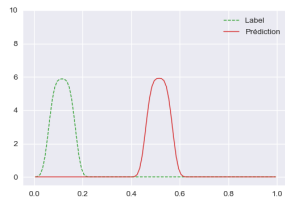
Taille d'une entree

Entrees/sortie pour le reseau de neurones

Meilleures/pires predictions du reseau de neurones



Les meilleures predictions

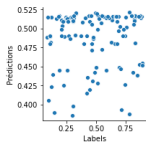


Les pires predictions

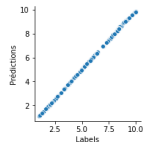
Scores 1D

Scores 1D

| Nom du score | Valeur |
|--------------|---------|
| R2 | 99.50 % |
| Personnalisé | 28.21 % |



Correlation des position



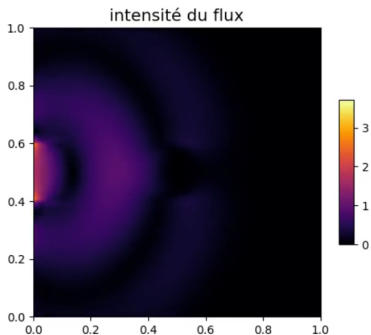
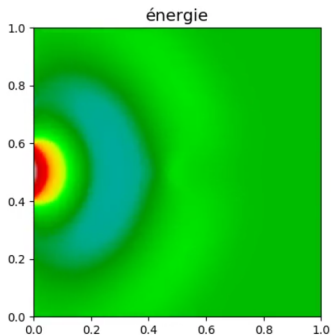
Correlation des hauteur

Conclusion sur la régression 1D

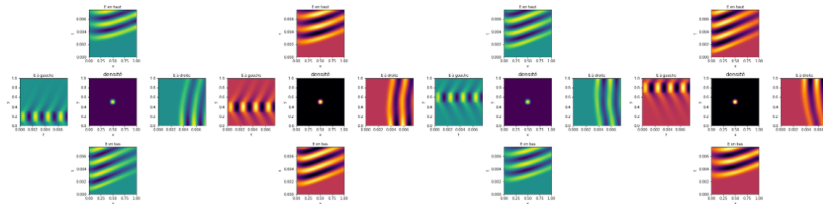
Les cause de l'échec:

- Le probleme inverse est probablement mal pose
- Le score R^2 est mal calcule

Exemple de simulation 2D



Entree sortie 2D



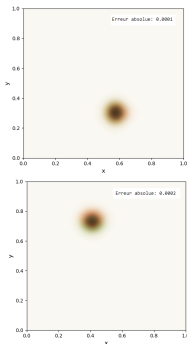
Entrees sortie pour le reseau de neurones

(168, 28, 48)

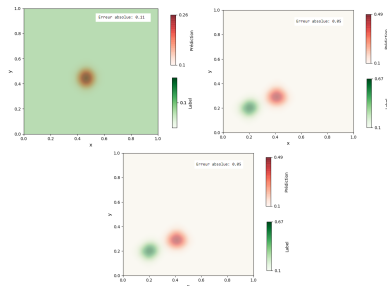
Dimension temporelle Dimension spatiale Nombre de canaux

Taille d'une entree

Meilleures/pires predictions du reseau de neurones



Les meilleures predictions

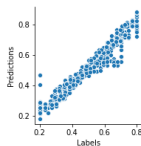


Les pires predictions

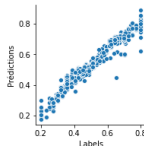
Scores 2D

Scores 2D

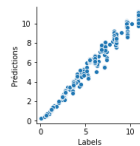
| Nom du score | Valeur |
|--------------|---------|
| R2 | 98.81 % |
| Personnalisé | 93.50 % |



Correlation de l'abscisse



Correlation de l'ordonnee



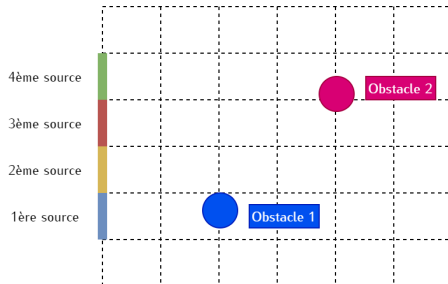
Correlation des hauteur

Conclusion sur la régression 2D

Detection de toutes les variables:

- L'abscisse, l'ordonnée, et la hauteur: reconstruction complete de la densité
- La valeur de la densité en dehors du crenau est connue

Classification 2D



Labels

Obstacle 1: 1 0 0 0

Obstacle 2: 0 0 1 1

Labels pour la classification

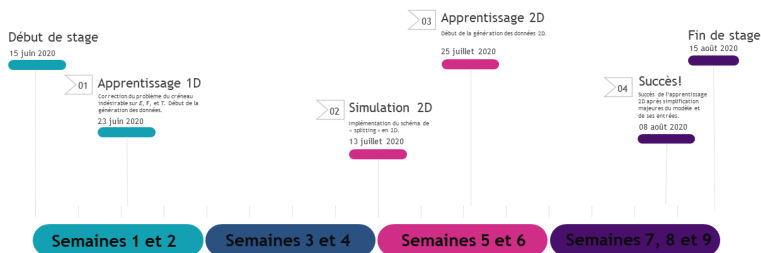
Scores de classification

| Nom | Valeur |
|-------|---------|
| R2 | 98.86 % |
| Pers. | 95.45 % |

Bilan de l'apprentissage

- 1 Régression 1D** : Permet de détecter la hauteur du créneau
- 2 Classification 2D** : Permet de localiser l'ordonnée du créneau
- 3 Régression 2D** : Permet de prédire tous les attributs essentiels du créneau (abscisse, ordonnée, et hauteur)

Bilan du stage



Points tournants du le stage

Apports et enseignements

- Développement C++ et Python
- Equations aux derivees partielles
- Reseaux de neurones
- Experience dans un milieu de recherche



Franck, E. (Oct. 2012). "Construction et analyse numérique de schéma asymptotic preserving sur maillages non structurés. Application au transport linéaire et aux systèmes de Friedrichs". In: *Archive ouverte HAL*, pp. 12, 160–161. URL: <https://tel.archives-ouvertes.fr/file/index/docid/744371/filename/theseFranckv3.pdf>.



Ganesh, Prakhar (Oct. 2019). "Types of Convolution Kernels : Simplified". In: URL: <https://towardsdatascience.com/types-of-convolution-kernels-simplified-f040cb307c37>.



Packt (s.d). "Convolutional neural networks". In: URL: https://subscription.packtpub.com/book/game_development/9781789138139/4/ch04lvl1sec31/convolutional-neural-networks.



Turpault, R. (Feb. 2004). "Modelisation, approximation numerique et applications du transfert radiatif en desequilibre spectral couple avec l'hydrodynamique". In: *Archive ouverte HAL*, pp. 13–22. URL: <http://docplayer.fr/177010094-Modelisation-approximation-numerique-et-applications-du-transfert-radiatif-en-desequilibre-spectral-couple-avec-l-hydrodynamique.html>.