Accelerating Machine learning of large nonlinear Hamiltonian dynamical systems combining Proper Symplectic Decomposition and Anderson mixing

Porteur : Damien Tromeur-Dervout (ICJ)
(Le porteur s'engage à participer et présenter son projet aux journées de la GI-EIF)
Partenaires : Bernhard Maschke (LAGEP)
Laboratoire : Institut Camille Jordan UMR578 CNRS-UL1-UJM-INSA-ECL-INRIA
Composante : Polytech Lyon

Nature du financement demandé : Stage de M2

Dates : 1 Mars 2027

Résumé : Ce projet vise à accélérer l'apprentissage machine des systèmes dynamiques hamiltoniens non linéaires à grande échelle en combinant la **Décomposition Symplectique Propre (DSP)** et la **méthode d'Anderson**. Les systèmes hamiltoniens, préservant des quantités comme l'énergie, sont complexes à modéliser numériquement. La DSP permet de réduire leur dimensionnalité tout en conservant leur structure symplectique, essentielle pour la précision des simulations. Elle extrait des modes dynamiques pertinents, simplifiant ainsi le problème. En parallèle, nous souhaitons investiguer la méthode d'Anderson, une technique d'optimisation itérative, pour accélérer la convergence des algorithmes d'apprentissage en exploitant les informations des itérations précédentes. Leur combinaison devrait permettre de réduire le temps de calcul tout en maintenant la fidélité aux lois physiques. L'objectif est de développer un cadre efficace pour l'apprentissage de modèles de systèmes hamiltoniens, utiles en physique, ingénierie ou sciences des données. Cette approche hybride intègre la robustesse des méthodes symplectiques et l'efficacité des techniques modernes de résolution de problèmes non linéaires, offrant une solution innovante pour des problèmes non linéaires à grande échelle.

Sujet développé :
L'apprentissage du flot d'un système dynamique à haute dimension pose des défis de calcul en raison de la « malédiction de la dimensionnalité ». Cela nécessite des puissances de calcul élevées et des temps longs d'apprentissage.

On s'intéresse donc à l'apprentissage d'un système dynamique non linéaire par un réseau de neurones, c.a.d de trouver les paramètres du réseau permettant d'évaluer l'évolution des solutions au cours du temps. Un réseau de neurone est une combinaison couches définies par des poids et munies d'une fonction d'activation non linéaire. L'apprentissage du réseau consiste à déterminer les poids en fonction de données d'apprentissage par la minimisation d'une fonctionnelle non linéaire

de « perte » donnant une mesure de la réponse du réseau à la solution attendue. La technique classique de ces réseaux est de déterminer ces poids par descente de gradient où ce dernier est calculé par rétro-propagation.

Un premier objectif de ce stage est d'investiguer des méthodes de résolution non linéaires modernes comme les méthodes de Gmres non linéaire matrix free ou de Anderson mixing qui ne nécessitent pas de calcul explicite de gradient. On se placera dans le cadre de la bibliothèque PETSc pour une implémentation parallèle de ces méthodes sur différents types d'architectures GPU et CPU. Une étude de l'efficacité parallèle et numérique de l'apprentissage des réseaux de Neurones sera réalisée notamment en fonction de leur nombre de paramètres, des techniques d'accélération de convergence de type Aitken [0] ou de type Shrank pourront être investiguées.

Le deuxième objectif est de réduire la dimensionnalité du problème Hamiltonien physique sous-jacent par des techniques de décomposition symplectique propre [1,2] permettant de conserver au mieux les invariants comme le Hamiltonien. L'idée est de faire apprendre le réseau de neurones sur ces modèles réduits. Le nombre de modes étant réduit, on s'attend aussi à une réduction du nombre de poids et de couche pour obtenir des prédictions réduites pertinentes qui pourront être projetées dans l'espace de grande dimension de départ (dans le même esprit que [6]). Les performances de cette approche en termes d'approximation numérique et d'efficacité parallèle seront investiguées, sur des systèmes non linéaires comme des systèmes à interface mobile de type Stefan non linéaire dans un premier temps.

Le troisième objectif est d'étendre les méthodes développées dans le cadre des Systèmes Hamiltonien à Ports (PHS) [3,4,5] en collaboration avec B. Maschke du Lagep et Dmitry Gromov du département de Mathématique de l'Université de Latvia(*)

Le candidat ou la candidate de formation mathématiques appliquées devra être à l'aise avec la programmation C/C++dans un environnement UNIX. Une connaissance de la programmation MPI/PETSc est souhaitée.

[0] Berenguer, L., Tromeur-Dervout, D., *Sparse Aitken–Schwarz domain decomposition with application to Darcy flow*, *Computers & Fluids*, 249, 105687,2022 doi: 10.1016/j.compfluid.2022.105687
[1] Bajārs, J., Kalvāns, D., Structure-preserving dimensionality reduction for learning Hamiltonian dynamics. Journal of Computational Physics, 2025, 528, 113832. DOI: 10.1016/j.jcp.2025.113832
[2] Bajārs, J., Kalvāns, D., Gromov, D. Unconstrained Parametrization of Proper Symplectic Decomposition for Learning Hamiltonian Dynamics, Lecture Notes in Computer Science, 2025, 15884 LNCS, pp. 15–26. DOI: 10.1007/978-3-031-97228-7_2
[3] Castaños, F., Gromov, D., Hayward, V., Michalska, H. Implicit and explicit representations of continuous-time port-Hamiltonian systems, Systems and Control Letters, 2013, 62(4), pp. 324–330. DOI: 10.1016/j.sysconle.2013.01.007
[4]P. Kotyczka, B. Maschke, L. Lefèvre, Weak Form of Stokes-Dirac Structures and Geometric Discretization of Port-Hamiltonian Systems, J. of Computational Physics, pp. 442-476, Vol. 361, Mai 2018. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.02.006
[5] A.J. van der Schaft and B.M. Maschke, "Hamiltonian formulation of distributed parameter systems with boundary energy flow", J. of Geometry and Physics, Vol. 42, n°1-2, 166– 194 , 2002. DOI: 10.1016/S0393-0440(01)00083-3
[6] Tromeur-Dervout,D., Vassilevski, Y., *Choice of initial guess in iterative solution of series of systems arising in fluid flow simulations*. *J. Comput. Phys*., 219(1):210–227, 2006

(*) permettant ainsi d'initier une collaboration scientifique pouvant mener à des échanges d'étudiants entre le département Mathématiques Appliquées et Modélisation de Polytech Lyon et le Master's in Mathematics and Data Science du département de Mathématique de l'Université de Latvia.