

# TIPE 2018-2019

## Résolution d'équations aux dérivées partielles par l'usage de réseaux de neurones

Thomas Pouplin (n° 21633)

## Problématique :

Comment utiliser les réseaux de neurones afin de mettre en oeuvre une méthode de résolution des équations aux dérivées partielles ?

Comment peut-on mettre en pratique une telle méthode dans le cadre de la résolution du modèle LWR ?

# Table des matières :

- ① Présentation de la méthode de résolution et du modèle LWR
  - Les réseaux de neurones
  - Le modèle LWR
  - La méthode de résolution
- ② Analyse des résultats et méthode des caractéristiques
  - Méthode des caractéristiques
  - Analyse des résultats
- ③ Bilan et évaluation de la méthode
  - Intérêt de la méthode
  - Limite de la méthode

# Définition générale

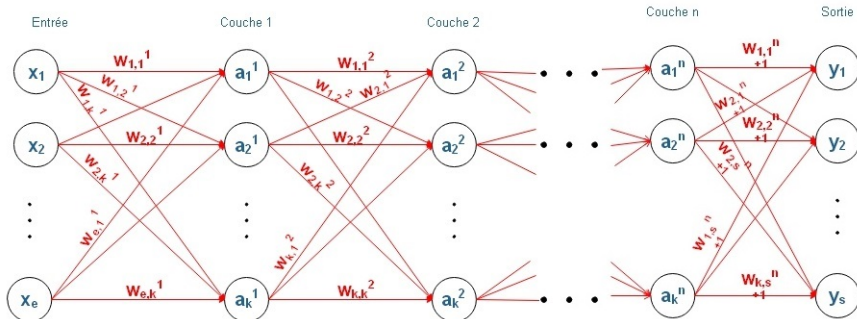
Un réseau de neurones permet de réaliser une fonction non linéaire de ses entrées.

## Theorem

*Théorème d'approximation universelle (König) : un réseau de neurones contenant un nombre fini de neurones peut approximer des fonctions continues sur des sous-ensembles compacts et ceci à n'importe quel degré de précision.*

# Notation

- $a_i^j$  est le neurone  $i$  de la couche  $j$
- $w_{i,j}^l$  est le poids de  $a_i^{l-1}$  à  $a_j^l$
- $b_i^j$  est le biais attaché à  $a_i^j$  (non représenté sur le graphe)
- Fonction d'activation :  $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$
- Les neurones  $a_i^j = \sigma(\sum_{m=1}^k w_{m,i}^j a_m^{j-1} + b_i^j)$



# Utilisation des réseaux de neurones

$$NN : \left\{ \begin{array}{c} \mathbb{R}^e \longrightarrow \mathbb{R}^s \\ \left[ \begin{array}{c} x1 \\ x2 \\ \vdots \\ xe \end{array} \right] \mapsto \left[ \begin{array}{c} y1 \\ y2 \\ \vdots \\ ys \end{array} \right] \end{array} \right.$$

avec

$$yi = \sigma(\sum_{m=1}^k w_{m,i}^n (\sigma(\sum_{n=1}^k w_{n,m}^{(n-1)} (\dots (\sigma(\sum_{u=1}^k w_{u,p}^1 x_m + b_p^1))) + b_m^{(n-1)}) + b_i^n).$$

*But de la méthode proposée* : on cherche à modifier NN de sorte qu'elle satisfasse une équation aux dérivées partielles.

# Les hypothèses

- Une route unidimensionnelle, sans intersection.
- Un modèle macroscopique : le trafic est un fluide incompressible et on fait l'hypothèse d'un milieu continu.
- Densité :  $\rho(x, t)$  ; Vitesse moyenne :  $v(x, t)$
- La vitesse moyenne dépend uniquement de la densité, selon la relation :  $v(\rho) = v_{max}(1 - \exp(\frac{-c}{v_{max}}(1 - \frac{\rho_{max}}{\rho})))$ .  
 $v_{max} = c = \rho_{max} = 1 \Rightarrow \underline{v(\rho) = (1 - \exp(1 - \frac{1}{\rho}))}$ .
- Flux de voitures :  $\underline{f = \rho v}$

# Loi de conservation

## Theorem

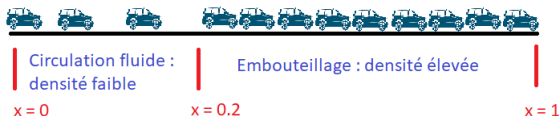
- *Loi de conservation* :  $\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx = f(x_1, t) - f(x_2, t)$
- *Forme locale* :  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f \circ \rho}{\partial x} = 0$



# Le modèle LWR : Situation initiale

On se place sur le carré  $[0, 1]^2$ .

On étudie une situation où on arrive dans un embouteillage :



Condition initiale :  $\rho(x, 0) = g(x)$  avec

$$g : \begin{cases} [0, 1] \rightarrow [0, 1] \\ x \mapsto \begin{cases} 0.65 & \text{si } x \leq 0.2 \\ 0.9 & \text{sinon} \end{cases} \end{cases}$$

# Fonction de coût

- Soit  $\theta$  l'éventuelle solution de notre problème.
- Soit  $\varphi$  la fonction de coût. Elle représente une quantité que l'on cherche à minimiser.
- $\varphi \simeq NN - \theta$

*Remarque :*  $\varphi = \varphi(w_{1,1}^1, w_{1,2}^1, \dots, w_{k,k}^{n+1}, b_1^1, \dots, b_k^{n+1})$

# Implémentation de la fonction de coût

Pour satisfaire l'équation, on minimise

$$\forall x, t \in [0, 1]^2 \quad \frac{\partial NN(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f \circ NN(x, t)}{\partial x}.$$

Pour  $I \subset [0, 1]^2$  :  $\varphi = \sum_{x, t \in I} \left( \frac{\partial NN(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f \circ NN(x, t)}{\partial x} \right)^2.$

Choix de  $I$  : un nombre fixé de points pris au hasard.

Remarque: on a besoin de  $\frac{\partial NN}{\partial t}$  et  $\frac{\partial NN}{\partial x}$ .

# Implémentation des conditions initiales : 1ère implementation

*On satisfait les conditions initiales par construction.*

$\forall x, t \in [0, 1]^2 \quad NN^* = A(x) + t \cdot NN(x, t)$  avec

$$A : \begin{cases} \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \begin{cases} 0.65 \text{ si } x \leq 0.2 \\ 0.9 \text{ sinon} \end{cases} \end{cases}$$

On a alors  $\varphi = \sum_{x,t \in I} \left( \frac{\partial NN^*(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f \circ NN^*(x,t)}{\partial x} \right)^2$ .

# Implémentation des conditions initiales : 2ème implementation

*On ajoute les conditions initiales dans le coût.*

$$\varphi = \sum_{x,t \in I} \left[ \left( \frac{\partial NN(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f \circ NN(x,t)}{\partial x} \right)^2 + ci \cdot B(x,t)^2 \right]$$

$$B : \begin{cases} \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} \\ x, t \mapsto \begin{cases} 0 & \text{si } t \neq 0 \\ NN(x,t) - 0.65 & \text{si } t = 0 \text{ et } x \leq 0.2 \\ NN(x,t) - 0.9 & \text{si } t = 0 \text{ et } x \geq 0.2 \end{cases} \end{cases}$$

$ci \in \mathbb{R}$  est un coefficient contrôlant le poids des conditions initiales dans le coût final.

Inconvénient de la seconde méthode : contrainte sur  $I$

# Algorithme du gradient

*Algorithme du gradient :*

- Calcul de  $\nabla\varphi(w_{1,1}^1, w_{1,2}^1, \dots, w_{k,k}^{n+1}, b_1^1, \dots, b_k^{n+1})$ ; i.e  $\frac{\partial\varphi}{\partial w_{i,j}^l}$  et  $\frac{\partial\varphi}{\partial b_i^l}$ ;

- “Descente du gradient” : 
$$\begin{cases} w_{i,j}^l \leftarrow w_{i,j}^l - v \cdot \frac{\partial\varphi}{\partial w_{i,j}^l} \\ b_i^l \leftarrow b_i^l - v \cdot \frac{\partial\varphi}{\partial b_i^l} \end{cases} ;$$

$v \in \mathbb{R}^+$  est la vitesse d'apprentissage

Remarque :

- L'algorithme du gradient permet d'arriver à un minimum local mais rien ne prouve que c'est un minimum global.
- L'utilisation de l'algorithme nécessite  $\sigma$  dérivable.

# Pseudo-code

---

## Algorithmic 1 pseudocode

---

```
1: Mise en place du réseau
2: Initialisation des poids et biais
3:  $N$  = nombre de périodes d'apprentissage
4: Définition de la fonction coût
5:
6: for  $j = 1$  to  $N$  do
7:    $I$  = Ensemble des points d'apprentissage pris au hasard
8:    $\varphi = 0$ 
9:
10:  for  $i$  in  $I$  do
11:     $\varphi += \text{coût}(i)$ 
12:  end for
13:  Calcul des dérivées partielles de  $\varphi$ 
14:  Descente du gradient
15: end for
```

# Principe Général

$$\text{Rappel : } \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f \circ \rho(x,t)}{\partial x} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + f'(\rho) \cdot \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} = 0$$

Méthode de résolution partielle.

## Theorem

$\rho$  solution de l'équation est constante le long de la courbe  
 $X : t \mapsto (x(t), t) \Rightarrow \forall t \in [0, 1] x'(t) = f'(\rho(x(t), t))$



# Preuve

*Soit  $\rho$  solution constante le long de la courbe*

$$\Rightarrow \forall t \in [0, 1] \frac{d\rho \circ X}{dt}(t) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial x}(x(t), t) \cdot x'(t) + \frac{\partial \rho}{\partial t}(x(t), t) = 0$$

$$\text{Puis } \rho \text{ solution de l'équation} \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial x}(x(t), t) \cdot f'(\rho) + \frac{\partial \rho}{\partial t}(x(t), t) = 0$$

$$\text{Donc } \forall t \in [0, 1] \frac{\partial \rho}{\partial x}(x(t), t) \cdot (x'(t) - f'(\rho)) = 0$$

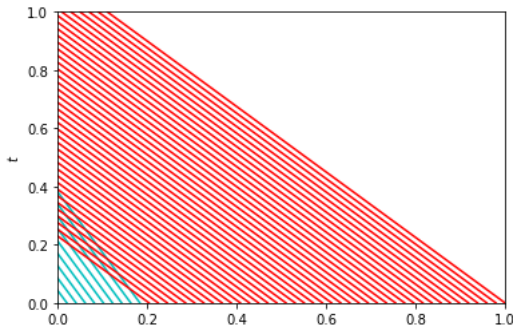
$$\text{D'où en supposant } \frac{\partial \rho}{\partial x}(x(t), t) \neq 0, \text{ on a } \underline{x'(t) = f'(\rho(x(t), t))}.$$

# Application de la méthode

$$\begin{cases} x'(t) = f'(\rho(x(t), t)) \\ \rho(x(t), t) \text{ constante} \end{cases} \Rightarrow x' \text{ constante}$$

$\Rightarrow$  la courbe  $(x(t), t)$  est une droite

La caractéristique partant de  $x_0$  à pour équation  $x(t) = f'(\rho(x_0, 0)) \cdot t + x_0$



## Solution faible : introduction

Soit  $\rho$  une solution de  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f(\rho)}{\partial x} = 0$

$\forall \varphi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$  à support compact,

$$\int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f(\rho)}{\partial x} \right) \varphi dx dt = 0.$$

$$\Rightarrow \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} \left( \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}} g(x) \varphi(x, 0) = 0$$

# Solution faible définition

## Definitions

Une fonction  $\rho$  intégrable sur  $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$  est une solution faible si et seulement si pour toute fonction  $\varphi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$  à support compact, elle respecte l'identité

$$\int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} \left( \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}} g(x) \varphi(x, 0) dx = 0$$

# Condition de Rankine-Hugoniot

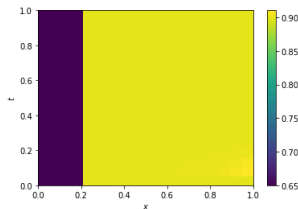
Soit  $\lambda$  la dérivée de la courbe de discontinuité,  $\rho^+$  et  $\rho^-$  les valeurs de  $\rho$  de part et d'autre de la discontinuité.

## Theorem

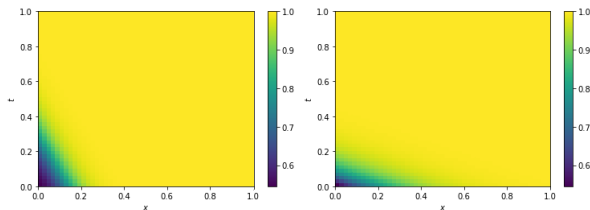
$$\text{Condition de Rankine-Hugoniot : } \lambda = \frac{f(\rho^+) - f(\rho^-)}{\rho^+ - \rho^-}$$

# Présentation des résultats : $\rho(x, t)$ sur $[0, 1]^2$ :

1ère implémentation des conditions initiales :



2ème implémentation des conditions initiales:

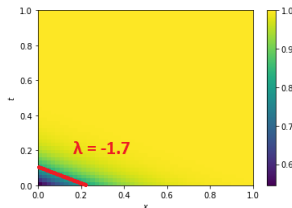
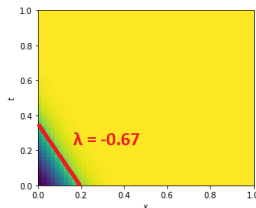
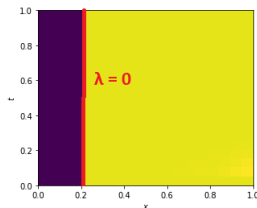


# Evaluation des résultats

- Condition de Rankine-Hugoniot :  $\lambda = \frac{f(\rho^+) - f(\rho^-)}{\rho^+ - \rho^-}$

Application numérique :

$$f(0.65) = 0.27 \text{ et } f(0.9) = 0.095 \Rightarrow \lambda = -0.70$$

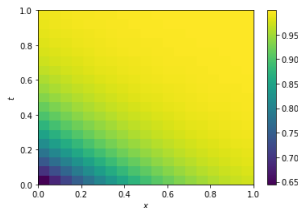


# Principe de généralisation

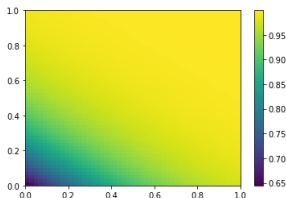
- Intérêt théorique: pas besoin de discrétiser
- Intérêt pratique : le résultat obtenu est bien une fonction et non le graphe de celle-ci.



# Exemple de généralisation 1



Entrainement sur un quadrillage de  $[0, 1]^2$  avec  $20 \times 20$  points



Résultat sur un quadrillage de  $[0, 1]^2$  avec  $50 \times 50$  points

# Complexité temporelle

On note :

- $N$  le nombre de périodes d'apprentissage
- $k$  la somme du nombre de poids et du nombre de biais
- $i$  le cardinal de l'ensemble  $I$  contenant les points utilisés pour une période d'apprentissage

La complexité temporelle de l'algorithme est alors en  $O(Nki)$

# Justification de la complexité temporelle

---

## Algorithmic 2 pseudocode

---

- 1: Mise en place du réseau
- 2: Initialisation des poids et biais
- 3:  $N$  = nombre de périodes d'apprentissage
- 4: Définition de la fonction coût
- 5: **for**  $j = 1$  to  $N$  **do**
- 6:    $I$  = Ensemble des points d'apprentissage
- 7:    $\varphi = 0$
- 8:   **for**  $i$  in  $I$  **do**
- 9:      $\varphi += \text{coût}(i)$
- 10:   **end for**
- 11:   Calcul des dérivées partielles de  $\varphi$
- 12:   Descente du gradient
- 13: **end for**

# Paralélisation des calculs

La partie la plus couteuse en temps est le calcul du coût total et de ses dérivées partielles par rapport aux poids et biais.

Solution : Décomposition du domaine d'apprentissage en sous domaine, chacun traité par un processeur différent.

On note  $H$  le nombre de processeurs utilisés.

La nouvelle complexité temporelle est en  $O(\frac{Nik}{H})$ .

# Dépendance aux hyper-paramètres

Exemples d'hyper-paramètres :  $n$  nombre de couches du réseau,  $k$  nombre de neurones par couche,  $N$  nombre de périodes d'apprentissage,  $v$  vitesse d'apprentissage, initialisation des poids etc...

- Recalibrage des hyper-paramètres à chaque fois que l'on change d'équation.
- L'aléatoire de la réussite des apprentissages dépend aussi de ses hyper-paramètres.

# Conclusion

Avantage :

- Temps de calcul
- Résultat facile à manipuler.
- Nombreuses améliorations possibles.

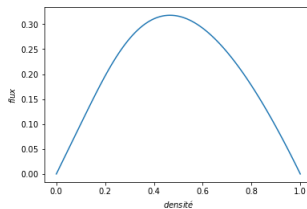
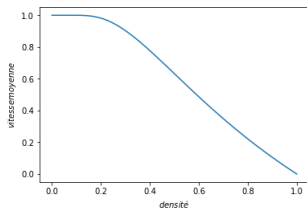
Inconvénient :

- Difficile à implémenter en pratique



## Remarques :

- $f \in C^\infty]0, 1]$  (et prolongeable continument en 0)
- $\forall x \in ]0, 1] f''(x) = \frac{-1}{x^3} < 0 \Rightarrow f$  est strictement concave





# Comparaison au méthode classique

Exemple de méthode par discrétisation : méthode des éléments finis

Temps de calcul (en seconde) selon la dimension  $n$  d'une solution sur  $[0, 1]^n$  avec une méthode de discrétisation :

Dimension :	1	2	10	100
Pas : $10^{-1}$	$10^{-8}$	$10^{-7}$	10	$10^{91}$
Pas : $10^{-3}$	$10^{-6}$	$10^{-3}$	$10^{21}$	$10^{291}$
Pas : $10^{-5}$	$10^{-4}$	10	$10^{41}$	$10^{491}$

( pour un processeur à 1Ghz)

# Tensorflow

- Code plus lisible, plus flexible
- Temps de calcul significativement amélioré

Plan d'un code utilisant Tensorflow :

- Construction de la structure d'un graphe
- Envoi de données dans le graphe

## Condition de Rankine-Hugoniot : Preuve

Soit  $\rho$  une solution faible admettant une discontinuité.

- $(X(t), t)$  la courbe sur laquelle se situe la discontinuité,  $(\lambda(t), 1)$  sa dérivée.
- $\Omega = [0, 1]^2$ ;  $\Omega^+ = [0, 1] \times [X(t), 1]$ ;  $\Omega^- = [0, 1] \times [0, X(t)]$
- $\rho|_{\Omega^+} = \rho^+$ ;  $\rho|_{\Omega^-} = \rho^-$

Soit  $\varphi \in C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$  à support compact telle que

$\forall x \in \mathbb{R} \varphi(x, 0) = 0$ , alors  $\int \int_{\Omega} (\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx dt = 0$

$$\Rightarrow \int \int_{\Omega^+} (\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx dt + \int \int_{\Omega^-} (\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx dt = 0$$

# Condition de Rankine-Hugoniot : Preuve

## Theorem

$$(1) \operatorname{div}(\varphi \vec{v}) = \varphi \operatorname{div}(\vec{v}) + \vec{v} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\varphi)$$

$$(2) \iiint_{\Omega} \operatorname{div}(\vec{v}) dV = \iint_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \vec{ds} \text{ avec } \vec{ds} \text{ un vecteur unitaire normal à la frontière dirigé vers l'extérieur.}$$

$$\begin{aligned} \int \int_{\Omega^-} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt &= \int \int_{\Omega^-} \rho \operatorname{div}(0, \varphi) dx dt \\ &= \int \int_{\Omega^-} \operatorname{div}(\rho(0, \varphi)) dx dt - \int \int_{\Omega^-} (0, \varphi) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\rho) dx dt \quad (1) \end{aligned}$$

$$= \int_{\partial\Omega^-} \rho(0, \varphi) \cdot \vec{dv} - \int \int_{\Omega^-} (0, \varphi) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\rho) dx dt \quad (2)$$

$$\text{avec } \vec{dv} = \alpha(1, -\lambda) dv \text{ et } \alpha = (1 + \lambda^2)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= - \int_{\partial\Omega^-} \alpha \rho \varphi \lambda(t) dv - \int \int_{\Omega^-} \frac{\partial \rho}{\partial t} \varphi dx dt$$

# Condition de Rankine-Hugoniot : Preuve

$$\begin{aligned} \text{Ainsi } \int_{\Omega^-} (\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx dt = \\ - \int \int_{\Omega^-} \varphi (\frac{\partial \rho^-}{\partial t} + \frac{\partial f(\rho^-)}{\partial x}) dx dt + \int_{\partial \Omega^-} (-\rho^- \varphi \lambda(t) + f(\rho^-) \varphi) \alpha dv \end{aligned}$$

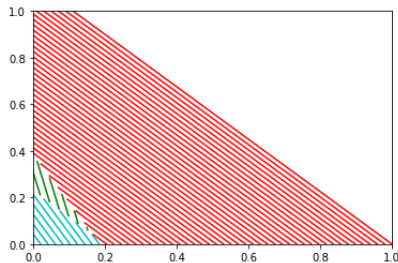
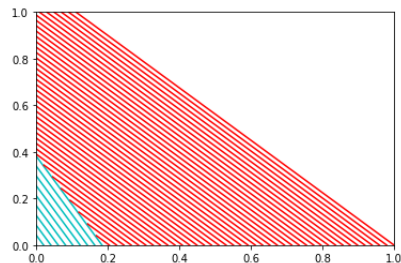
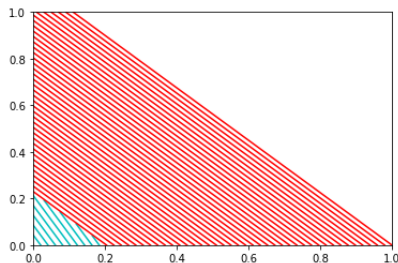
$$\begin{aligned} \text{De même, } \int \int_{\Omega^+} (\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(\rho) \frac{\partial \varphi}{\partial x}) dx dt = \\ - \int \int_{\Omega^+} \varphi (\frac{\partial \rho^+}{\partial t} + \frac{\partial f(\rho^+)}{\partial x}) dx dt + \int_{\partial \Omega^+} (-\rho^+ \varphi \lambda(t) + f(\rho^+) \varphi) \alpha dv \end{aligned}$$

$$\Rightarrow - \int_{\partial \Omega^-} (-\rho^+ \lambda(t) + f(\rho^+)) \varphi \alpha dv + \int_{\partial \Omega^-} (-\rho^- \lambda(t) + f(\rho^-)) \varphi \alpha dv = 0$$

$$\Rightarrow \int_{\partial \Omega^-} ((\rho^+ - \rho^-) \lambda(t) + (f(\rho^-) - f(\rho^+))) \alpha \varphi dv = 0$$

$$\Rightarrow (\lambda(t)(\rho^+ - \rho^-) + (f(\rho^-) - f(\rho^+))) = 0$$

# Lax entropy condition : notion d'entropie



# Lax entropy condition : la condition

## Theorem

*Condition d'entropie de Lax :  $f'(\rho^-) > \lambda > f'(\rho^+)$*

Rappel :

- L'équation d'une caractéristique  $x$  partant de  $x_0$  pour  $t = 0$  est  $x(t) = f'(\rho(x_0, 0)) \cdot t + x_0$
- Le flux  $f$  est strictement concave.

Remarque :

$$f'(\rho^-) > f'(\rho^+) \Leftrightarrow \rho^- < \rho^+$$

# Pseudo-code après parallélisation

---

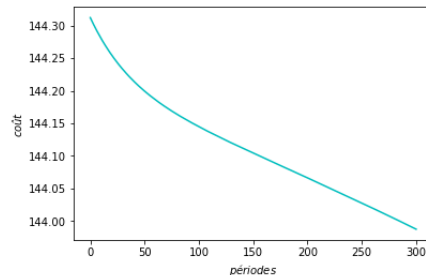
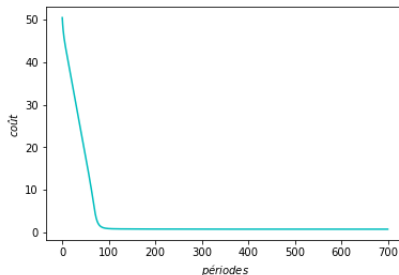
## Algorithmic 3 pseudocode

---

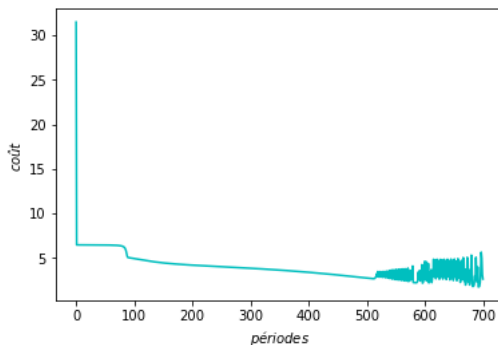
```
1: Mise en place du réseau
2: Initialisation des poids et biais
3:  $N$  = nombre de périodes d'apprentissage
4: Définition de la fonction coût
5:  $H$  = nombre de processeurs utilisés
6: for  $j = 1$  to  $N$  do
7:   for  $h = 1$  to  $H$  do
8:      $lh$  = Ensemble des points d'apprentissage pour le processeur  $h$ 
9:   end for
10:   $\varphi = 0$ 
11:  for  $h = 1$  to  $H$  do {en parallèle}
12:    for  $i$  in  $lh$  do
13:       $\varphi += \text{coût}(i)$ 
14:    end for
15:    Calcul des dérivées partielles de  $\varphi$ 
16:    Descente du gradient
17:  end for
```



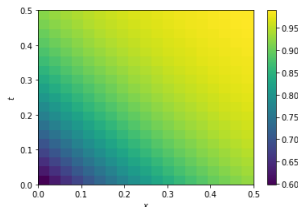
## Difficulté : nombre de périodes d'apprentissage



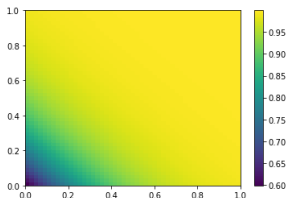
## Difficulté : vitesse d'apprentissage



## Autre exemple de généralisation



Entraînement sur un quadrillage de  $[0, 0.5]^2$  avec  $20 \times 20$  points



Résultat sur un quadrillage de  $[0, 1]^2$  avec  $50 \times 50$  points

# Code

```
1 # -*- coding: utf-8 -*-|
2 import tensorflow as tf
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import numpy as np
5
6 def B(x): # Condition initiale
7     cond = tf.cast(x <= 0.2, tf.float32)
8     return (0.65 * cond) + ((1-cond) * 0.9)
9
10
11 def df(x): # Dérivé du flux
12     return 1-tf.exp(1-1/x) + (-1/(x))*tf.exp(1 - 1/x)
13
14 def Init(x): # permet de séparer les points qui sont contraints par les conditions initiales
15     return (tf.cond(x <= 0, lambda: [1.], lambda:[0.]))
16
17
18 # Définition de l'espace :
19 nx = 20
20 ny = 20
21
22 x_space = (np.linspace(0., 1., nx))
23 y_space = (np.linspace(0., 1., ny))
24
25
26 # Neurones par couche ( on a 2 couches) :
27 n_nodes_hl1 = 20
28 n_nodes_hl2 = 20
29
30
31 x = tf.placeholder('float', [None, 2])
32
```

# Code suite

```
34 def neural_network_model(data, grad_coef=10): # Initialisation du réseau
35     # Mise en place du réseau :
36     hidden_1_layer = {'weights': tf.Variable(tf.random_normal([2, n_nodes_h1])),
37                       'biases': tf.Variable(tf.random_normal([n_nodes_h1]))}
38
39     hidden_2_layer = {'weights': tf.Variable(tf.random_normal([n_nodes_h1, n_nodes_h2])),
40                       'biases': tf.Variable(tf.random_normal([n_nodes_h2]))}
41
42     output_layer = {'weights': tf.Variable(tf.random_normal([n_nodes_h2, 1])),
43                     'biases': tf.Variable(tf.random_normal([1]))}
44
45     l1 = tf.add(tf.matmul(data, hidden_1_layer['weights']), hidden_1_layer['biases'])
46     l2 = tf.add(tf.matmul(l1, hidden_2_layer['weights']), hidden_2_layer['biases'])
47     output = tf.add(tf.matmul(l2, output_layer['weights']), output_layer['biases'])
48
49     output = tf.sigmoid(output)
50
51     trial = output
52
53     # Implémentation du coût :
54     d = tf.gradients(trial, data)[0]
55     cost = tf.add(tf.multiply(d[:, 0], f(trial)), d[:, 1])
56     cost = tf.square(cost)
57     cost = tf.reduce_mean(cost)
58
59     # Contrainte des conditions initiales :
60     additional_cost = tf.reduce_sum(tf.multiply(tf.transpose([tf.map_fn(aux, data[:, 1])], (tf.square(trial-B(tf.transpose([data[:, 0]))))))))
61
62     # Coût final :
63     cost += grad_coef * additional_cost
64
65     return [trial, cost]
66
67
68 def train_neural_network(x): # Apprentissage
69
70     net_out, cst= neural_network_model(x)
71     optimizer = tf.train.GradientDescentOptimizer(0.0001).minimize(cst) # Choix de l'algorithme d'optimisation
72     hm_epochs = 1001 #Nombre de période d'apprentissage
73
74     fd = {x: [[xi, yi]
75              for xi in x_space for yi in y_space]}
76
77     with tf.Session() as sess: # Boucle d'apprentissage
78         sess.run(tf.global_variables_initializer())
79         for epoch in range(hm_epochs):
80             epoch_loss = sess.run([optimizer, cst], feed_dict=fd)
81             print(sum(epoch_loss))
```

# Code dérivées à la main

```
1 import numpy as np
2 from matplotlib import pyplot as plt
3 Nx = 10
4 Ny = 10
5 dx = 1. / Nx
6 dy = 1. / Ny
7 x_space = np.linspace(0, 1, Nx)
8 y_space = np.linspace(0, 1, Ny)
9
10 def sigmoid(x):
11     return 1. / (1. + np.exp(-x))
12
13 def d_sigmoid(x):
14     return np.exp(-x) / ((1 + np.exp(-x))**2)
15
16 def d2_sigmoid(x):
17     return ((-np.exp(-x) / ((1 + np.exp(-x))**2)) + (2*np.exp(-2*x) / ((1+ np.exp(-x))**3)))
18
19 def carre(x):
20     return x**2
21
22 def produit(x,y): #fait le produit terme à terme de deux vecteurs
23     K = []
24     for i in range(len(x)):
25         K.append(x[i]*y[i])
26     return np.asarray(K)
27
28 def f(x):
29     return x*(1-np.exp(1-1/x))
30
31 def df(x):
32     return (1-(1+(1/x))*np.exp(1-1/x))
33
34 def neural_network(W, x):
35     a1 = sigmoid(np.dot(W, W[0]))
36     return np.dot(a1, W[1])
37
38 #les dérivées premières et seconde du réseau de neurones pour les variables de l'espace x et y.
39 def dx_neural_network(W, x):
40     a1 = d2_sigmoid(np.dot(W, W[0]))
41     a1 = produit(a1, np.apply_along_axis(carre, 0, W[0][0]))
42     return np.dot(a1, W[1])
43
44 def dy_neural_network(W, x):
45     a1 = d2_sigmoid(np.dot(W, W[0]))
46     a1 = produit(a1, np.apply_along_axis(carre, 0, W[0][1]))
47     return np.dot(a1, W[1])
48
49 def dx_neural_network(W, x):
50     a1 = d_sigmoid(np.dot(W, W[0]))
51     a1 = produit(a1, W[0][0])
52     return np.dot(a1, W[1])
53
54 def dy_neural_network(W, x):
55     a1 = d_sigmoid(np.dot(W, W[0]))
56     a1 = produit(a1, W[0][1])
57     return np.dot(a1, W[1])
58
59 def dvi_err(W,x,e,net_out,dx): #la dérivé du coût par rapport aux poids de la deuxième couche
60     l = np.zeros((1,))
61     for i,vi in enumerate(l):
62         de = sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + x[i]*W[0][1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + \
63             (x[i]*W[0][1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i]*(df(psy_trial(x,net_out))) + \
64             (x[i]*dx)*((x[i])*(sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])*(1 - np.exp(1-1/(psy_trial(x,net_out)))) - \
65             - psy_trial(x,net_out) * ((x[i])*(sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])) + (1/(psy_trial(x,net_out)**2))*np.exp(1-1/psy_trial(x,net_out))))
66         de = 2*de*vi
67         l[i] = de
68     return l
```

## Code dérivées à la main suite

```
70 def dwj_err(W,x,e,net_out,dx): #La dérivé du coût par rapport aux poids de la première couche
71     l = np.zeros((2,10))
72     for i, w0i in enumerate(W[0][0]):
73         de = x[0]*W[1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + x[1]*(x[0]*W[1][i]*W[0][1][i]*d2_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])\
74             + x[1]*(x[0]*W[1][i]*W[0][0][i]*d2_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + W[1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])*f(psy_trial(x,net_out))\
75             + x[1]*(dx)*x[1]*x[0]* W[1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i]*(1 - np.exp(1-1/psy_trial(x,net_out))) - \
76             psy_trial(x,net_out)*1/(psy_trial(x,net_out)**2))*np.exp(1-1/psy_trial(x,net_out)))
77         de = 2*de
78         l[0][i] = de
79     for i, w0i in enumerate(W[0][1]):
80         de = x[1]*W[1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + x[1]*(x[1]*W[1][i]*W[0][1][i]*d2_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])\
81             + W[1][i]*sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i] + x[1]*(x[1]*W[1][i]*W[0][0][i]*d2_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i])*f(psy_trial(x,net_out))\
82             + x[1]*(dx)*x[1]*x[1]* W[1][i]*d_sigmoid(np.dot(x, W[0]))[i]*(1 - np.exp(1-1/psy_trial(x,net_out))) - \
83             psy_trial(x,net_out)*1/(psy_trial(x,net_out)**2))*np.exp(1-1/psy_trial(x,net_out)))
84         de = 2*de
85         l[1][i] = de
86     return l
87
88
89 def A(x): #Condition initiale
90     if x[0] <= 0.2: a = 0.65
91     else: a = 0.9
92     return a
93
94 def NN_trial(x, net_out): #implémentation des conditions initiales
95     return A(x) + x[1]*net_out
96
97 def loss_function(W, x, y): # Calcul du coût et des dérivées partielles de celui-ci
98     loss_sum = 0.
99     grad = [np.zeros((2,10)), np.zeros((10,1))]
100     for xi in x:
101         for yi in y:
102             input_point = np.array([xi, yi])
103             net_out = neural_network(W, input_point)[0]
104             dx = dx_neural_network(W, input_point)[0]
105             dy = dy_neural_network(W, input_point)[0]
106
107             gradient_of_trial_dx = yi*(dx)
108             gradient_of_trial_dy = net_out + yi*dy
109
110             cost = (gradient_of_trial_dx*df(net_out) + gradient_of_trial_dy)
111
112             grad[0] += dwj_err(W,input_point,cost,net_out,dx)
113             grad[1] += dwj_err(W,input_point,cost,net_out,dx)
114
115             cost = ((gradient_of_trial_dx*df(net_out) + gradient_of_trial_dy)**2
116                 + loss_sum)
117             loss_sum += cost
118     return grad
119
120 def apprentissage(W,vitesse): # Descente du gradient
121     for i in range(100):
122         loss_grad = loss_function(W,x_space,y_space)
123
124         W[0] = W[0] - vitesse * loss_grad[0]
125         W[1] = W[1] - vitesse * loss_grad[1]
126
127 W = [np.random.random((2, 10)), np.random.random((10, 1))]
```