Algorithme Glouton faible par apprentissage

Congo Job
sous la direction de Joubine Aghili

Université de Strasbourg
Institut de Recherche de Mathématiques Avancées (IRMA)

25 août 2022

Contexte

- 7 équipes de recherche
- 130 membres, dont 87 chercheurs et enseignants-chercheurs
- Au sein de l'équipe "Modélisation et Contôle"

IRMA
Institut de Recherche Mathématique Avancée

Objectif

Objectif : Trouver un substitut à l'erreur de projection dans l'algorithme glouton.
Dans le cadre des EDP paramétrée, la méthode des bases réduites s'avère souvent être une option de premier choix.

Algorithme Glouton

Require: $\wedge_{test}$ un ensemble, $u_{EF}(\mu)$ et $u_{BR}(\mu)$ 2 fonctions
choisir μ_1 de manière aléatoire
$u_1 = u_{EF}(\mu)$
$B_1 = Vect(u_1)$
for i allant de 2 à N_0 **do**
$u_i := \underset{\mu \in \wedge_{test}}{argmax}(||u_{EF}(\mu) - P_{B_i} u_{BR}(\mu)||)$
$B_i := Vect(B_{i-1} \cup u_i)$
end for
Ensure: retourner B_{N_0}

Exemple d'EDP paramétrée :

$$\begin{cases} y'' + \mu y = 1 & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \\ \mu \text{ le paramètre} & \end{cases}$$

Etapes du stage

Objectif principal : Construire un algorithme Glouton faible avec une modèle entrainé par réseau de neurone.

Etapes du stage :

- Implémenter un exemple en 1d en Python avec la méthode des éléments finis et donner une validation avec la solution exacte.
- Implémenter la méthode des bases réduites et faire une validation.
- Entrainer un réseau de neurone apprenant l'erreur de projection à l'aide de PyTorch/TensorFlow.
- Extension au cas 2D avec Feel++ et les bibliothèques adaptées.

Exemple 1D

On s'intéresse au problème 1D paramétrée par μ issue d'un miniprojet d'Alexandre Ern [3]:

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial x}\left(D \cdot \frac{\partial u}{\partial x}\right) + u = f, & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \\ D(x) = \begin{cases} 1, x \in \Omega_1 \\ \mu, x \in \Omega_2 \end{cases} & \end{cases}$$

Décomposition de Ω en Ω_1 et Ω_2

Formulation Variationnelle

La formulation variationnelle s'écrit : trouver $u \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$a(u, v; \mu) = l(v), \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

En posant :

$$\forall u, v \in H_0^1(\Omega) \qquad a(u, v; \mu) := \int_{\Omega_1} v'u' + \mu \int_{\Omega_2} v'u' + \int_{\Omega} vu,$$

$$l(v) := \int_{\Omega} fv.$$

Discrétisation de Ω

Soit Ω un segment, que l'on décompose en Ω_1 et Ω_2 disjoints et construit un maillage équidistant :

$$\Omega = \bigcup_{i=0}^{N-1} K_i$$

tel que :

1. N est le nombre d'éléments du maillage et h le pas constant vaut $\frac{1}{N-1}$.
2. $K_i = [x_i, x_{i+1}]$ avec x_i les noeuds du maillage.
3. On suppose que chaque maille K_i se trouve soit dans $\overline{\Omega_1}$ soit dans $\overline{\Omega_2}$.

Décomposition de Ω en K_i

Discrétisation de $H_0^1(\Omega)$

Algorithme Glouton faible par apprentissage

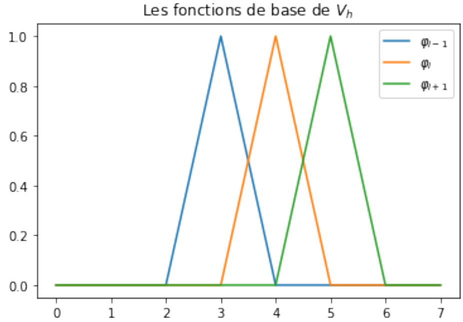
Congo Job sous la direction de Joubine Aghili

Introduction
Contexte
Objectif du stage
Elements finis
Formulation Variationnelle
Discrétisation du problème
Construction des espaces d'approximation
Construction des matrices éléments finis
Validation
Modèle réduit
Formulation du problème réduit
Espace des bases réduites V_{N_0}
Matrices réduites
Etude du modèle réduit
Conclusion et perspectives

Une discrétisation possible de $H_0^1(\Omega)$ est l'espace $V_{h,0}$ défini par :

$$V_{h,0} = \{u \in V_h \mid u_{|\partial\Omega} = 0\}$$

$$V_h = Vect(\{\varphi_i\})$$



Problème approché

En remplacant $H_0^1(\Omega)$ par $V_{h,0}$, on va chercher à résoudre le problème discret :

$$\text{Trouver } u_h \in V_{h,0} \text{ tel que : } a(u_h, v_h; \mu) = l(v_h), \forall v_h \in V_{h,0}$$

Matrices éléments finis

Notons

$$A_\mu := \begin{pmatrix} & & \\ & a(\varphi_i, \varphi_j; \mu) & \\ & & \end{pmatrix} \quad X_\mu := \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ . \\ . \\ . \\ \alpha_{N-1} \end{pmatrix} \quad \text{et } b := \begin{pmatrix} \\ l(\varphi_j) \\ \\ \end{pmatrix}$$

Résoudre le problème discret revient à touver X_μ tel que

$$A_\mu X_\mu = b$$

où :

1. $A_\mu = A_1 + \mu A_2 + M$
2. $A_1 = \int_\Omega \mathbb{1}_{\Omega_1} \varphi_i' \varphi_j'$, $A_2 = \int_\Omega \mathbb{1}_{\Omega_2} \varphi_i' \varphi_j'$, $M = \int_\Omega \varphi_i \varphi_j$
3. $b = \int_\Omega f \varphi_j$

Matrices éléments finis

Posons

$$D := \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Après calculs on a :

$$A_1 := \frac{1}{h} \begin{pmatrix} D & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & D & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & D & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & D & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & D \end{pmatrix} \qquad M := h \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$A_2 := \frac{1}{h} \begin{pmatrix} \cdot & D & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & D & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & D & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & D \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \qquad b := h \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Validation

Fixons $\mu = 1$ et le problème 1D se réécrit :

$$\begin{cases} -u'' + u = 1 \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

Ce problème admet une unique solution $u_{ex}(x)$ connue:

$$\forall x \in \Omega, u_{ex}(x) = C_1 \exp(-x) + C_2 \exp(x) + 1$$

$$\text{avec } C_1 = \frac{1-e}{e-e^{-1}} \text{ et } C_2 = \frac{e^{-1}-1}{e-e^{-1}}$$

Estimations d'errreur

Quelques résultats pour évaluer la solution u_{EF} :

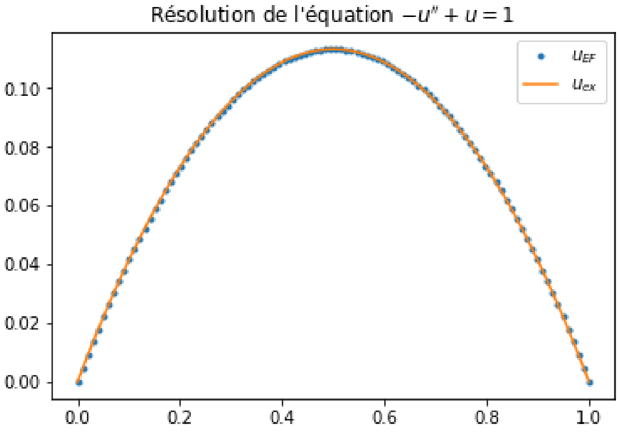
$$||u - u_h||_{1,\Omega} \leq ch|u|_{2,\Omega}$$

$$||u - u_h||_{0,\Omega} \leq ch^2|u|_{2,\Omega}$$

où $u \in H^2(\Omega)$ et $c \geq 0$ est indépendant de h

Illustration des Résultats

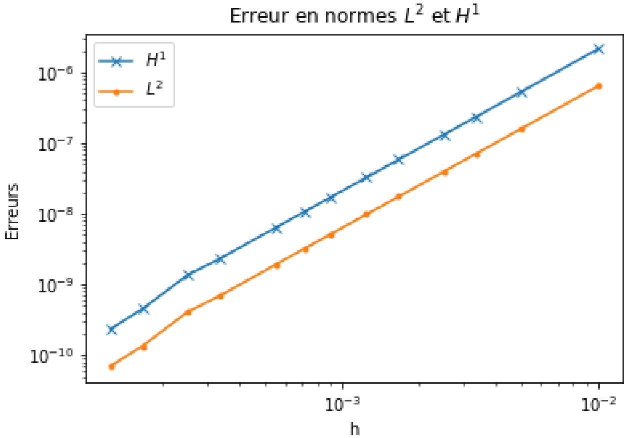
Pour $N = 100$, on a :



Solution exacte u_{ex} et solution élément fini u_{EF}

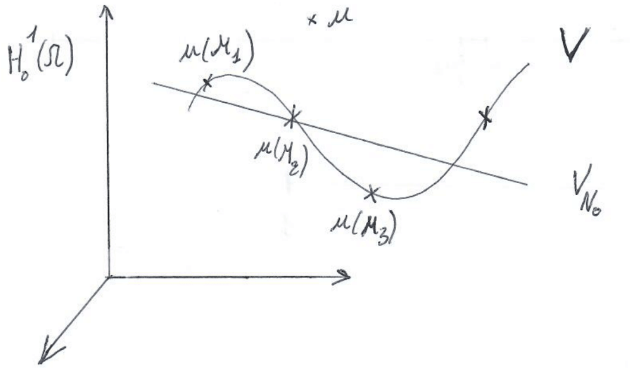
Illustration des erreurs

Pour diverses valeurs de N, on a:



Erreurs $||u_{ex} - u_{EF}||_{L^2}$ et $||u_{ex} - u_{EF}||_{H^1}$ en fonction de h

Modèle réduit



La méthode des bases réduites s'appuie sur le fait que les solutions de l'EDP vivent sur unevariété V. On fait l'hypothèse fondamentale que $V \approx V_{N_0}$, avec V_{N_0} un espace affine de faible dimension.

Modèle réduit

On cherche $X_\mu^{br} := \begin{pmatrix} x_{\mu,1}^{br} \\ \vdots \\ x_{\mu,N_0}^{br} \end{pmatrix}$ tel que

$$u^{br}(\mu) = x_{\mu,1}^{br} u_1 + \ldots + x_{\mu,N_0}^{br} u_{N_0}$$

Les fonctions u_i sont appelés «snapshot», et sont obtenues en résolvant le problème approché par éléments finis.

Construction de la base réduite

On définit $\wedge_{test} \subset \wedge = \mathbb{R}_*^+$
En pratique :

$$\wedge_{test} := \{\mu_1, ..., \mu_M\} \text{ et } M \approx 100$$

Grâce à l'algorithme Glouton avec $\wedge_{test}$, on a la base réduite :

$$V_{N_0} := vect(u_1, u_2, ..., u_{N_0}) \text{ et } \wedge_{trial} := \{\mu_1, ..., \mu_{N_0}\}$$

Matrices réduites

En posant

$$U = (u_1, ..., u_{N_0})$$

Et construisant

$$V_0^{BR} := U^T(A_0 + M)U \quad \text{et} \quad V_1^{BR} := U^T A_1 U$$

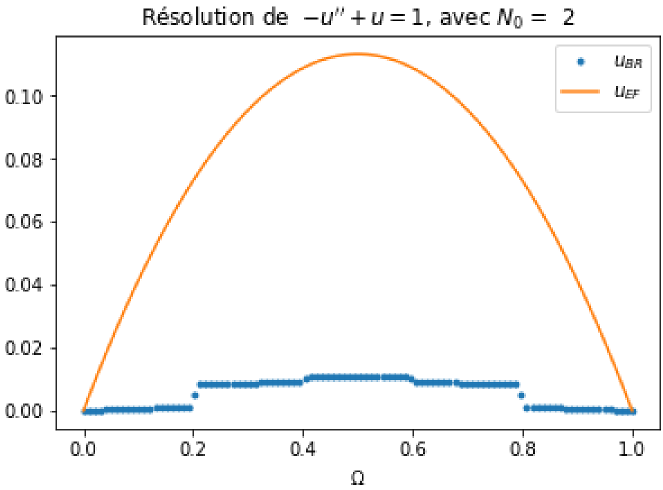
Avec les relations suivantes :

$$B^{BR} := U^T b \text{ et } A_\mu^{BR} = V_0^{BR} + \mu V_1^{BR}$$

Résoudre le problème réduit revient finalement à trouver X_μ^{br} tel que :

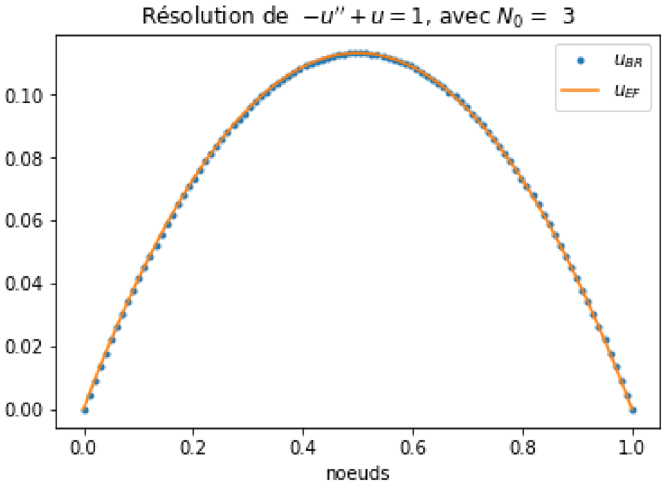
$$A_\mu^{BR} X_\mu^{br} = B^{br}$$

Résolution BR avec $N_0 = 2$



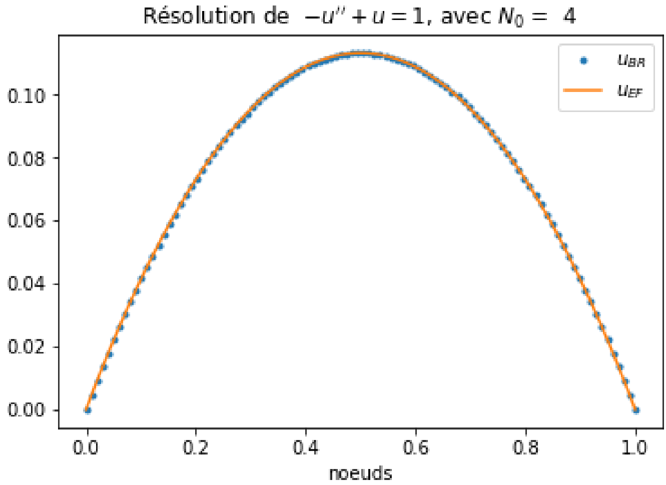
Solutions Eléments Finis et Base Réduite

Résolution BR avec $N_0 = 3$



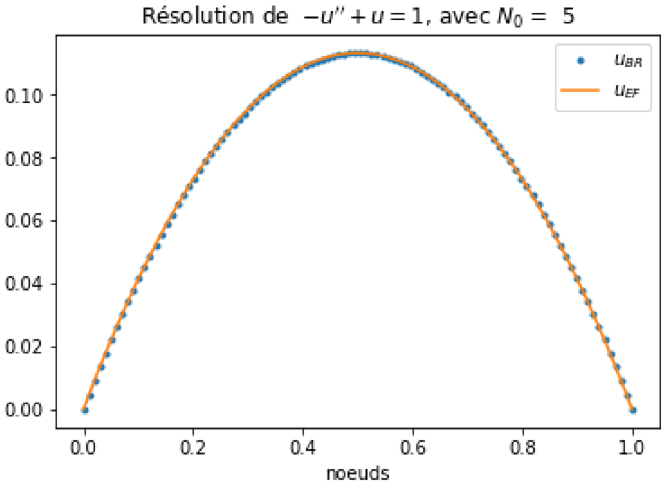
Solutions Eléments Finis et Base Réduite

Résolution BR avec $N_0 = 4$



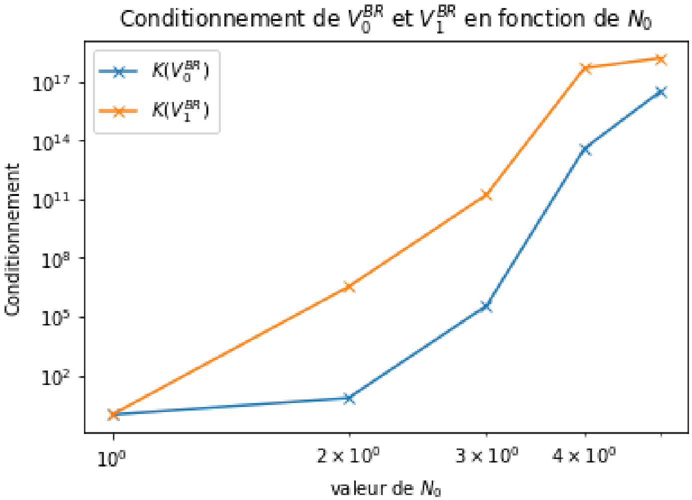
Solutions Eléments Finis et Base Réduite

Résolution BR avec $N_0 = 5$



Solutions Eléments Finis et Base Réduite

Le conditionnement

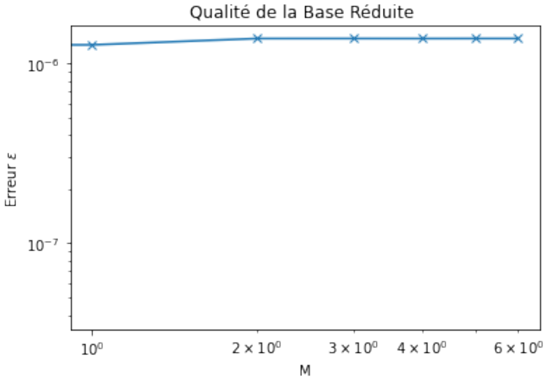


Evolution du conditionnement

Qualité de la base réduite

Après construction de V_{N_0}, on calcule

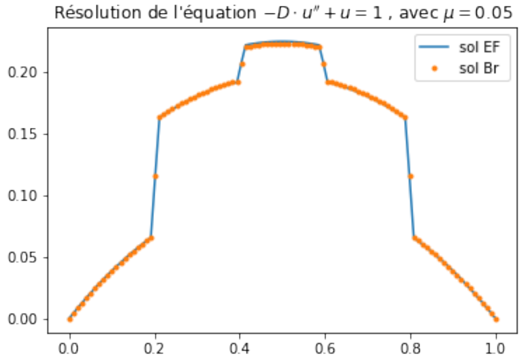
$$\epsilon := \sup_{\mu \in \wedge_{test}} ||u^{EF}(\mu) - u^{RB}(\mu)||_{L^2} \text{ où } \wedge_{test} \cap \wedge_{trial} = \emptyset$$



Erreur ϵ pour $M \in \{10, 100, 500, 1000, 2000, 2500, 3000\}$

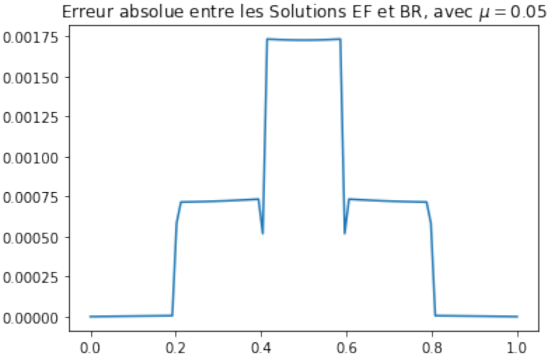
Résolution avec $N_0 = 3$ et $\mu = 0.05$

En fixant $\mu = 0.05$, voici la résolution du problème éléments finis et du problème réduit :



Solution Elément Finis et Base Réduite pour $\mu = 0.05$

Erreur absolue



Erreur en valeur absolu entre les solutions EF et BR pour $\mu = 0.05$

Conclusion et perspectives

Perspectives : remplacer $f(\mu) = \underset{\mu \in \wedge_{test}}{argmax}(||u_{EF}(\mu) - P_{B_i} u_{BR}(\mu)||)$ dans par un réseau de neuronne $NN(\mu)$ puis réaliser avec Feel++ l'extension 2D/3D.

Algorithme Glouton

Require: $\wedge_{test}$ un ensemble, $u_{EF}(\mu)$ et $u_{BR}(\mu)$ 2 fonctions

choisir μ_1 de manière aléatoire

$u_1 = u_{EF}(\mu)$

$B_1 = Vect(u_1)$

for i allant de 2 à N_0 **do**

$u_i := \underset{\mu \in \wedge_{test}}{argmax}(||u_{EF}(\mu) - P_{B_i} u_{BR}(\mu)||)$

$B_i := Vect(B_{i-1} \cup u_i)$

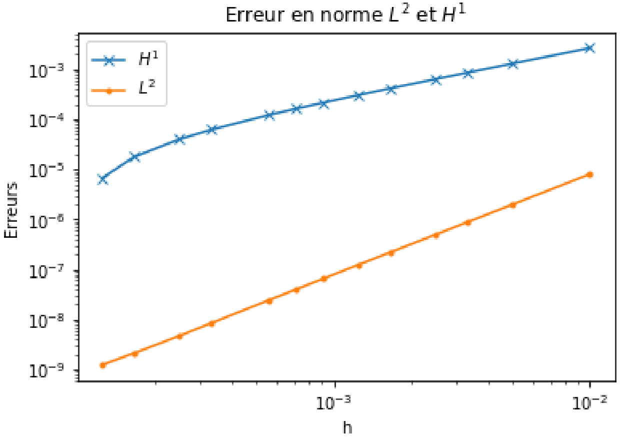
end for

Ensure: retourner B_{N_0}

References I

- Gianluigi Rozza, *An introduction to reduced basis method for parametrized PDEs*
- B. Haasdonk, *Reduced Basis Methods for Parametrized PDEs – A Tutorial Introduction for Stationary and Instationary Problems*
- Alexandre Ern, *Analyse numérique et optimisation Méthode des bases réduites*
- Gwenol Grandperrin, *Introduction à la méthode des bases réduites*

Erreur L2 et H1



Matrices réduites

On sait que u_μ^{BR} et u_i se décomposent sous la forme

$$u_{BR}^{\mu} = \sum_{i=1}^{N_0} X_{\mu,i}^{BR} u_i$$

$$u_i = \beta_0\varphi_0 + \ldots + \beta_{Nel-1}\varphi_{Nel-1}$$

Et par billinéaire et linéarité de l et a_μ, on a :

$$a_\mu(u_\mu^{BR}, u_i) = \sum_{i=1}^{N_0} \sum_{k,j=0}^{Nel-1} X_{\mu,i}^{BR} \beta_{i,k}\beta_{i,j} a_\mu(\varphi_k, \varphi_j)$$

$$l(u_i) = \sum_{i=1}^{N_0} \sum_{j=0}^{Nel-1} \beta_{i,j} l(\varphi_j)$$

Matrices réduites

Posons maintenant

$$X^{br} = \begin{pmatrix} X^{br}_{\mu,1} \\ . \\ . \\ . \\ X^{br}_{\mu,N_0} \end{pmatrix} U = (u_1, ..., u_{N_0})$$

On réécrit sous forme matricielle :

$$(U^T A_\mu U) X^{br} = U^T (A_0 + M) U + \mu U^T A_1 U = U^T b$$

Notons

$$V_0^{BR} := U^T (A_0 + M) U \quad \text{et} \quad V_1^{BR} := U^T A_1 U$$

Ainsi on a les relations suivantes :

$$B^{BR} := U^T b \text{ et } A_\mu^{BR} = V_0^{BR} + \mu V_1^{BR}$$

Matrices éléments finis

Les conditions aux bords sont imposés fortement dans la matrice A_1 et b.

$$(A_\mu)_{ij} = \begin{cases} A_{ij}, \forall i, j \in \{1, ..., Nel - 2\} \\ 1, \text{ lorsque (i, j) = (0,0) ou (i, j) = (Nel-1,Nel-1)} \\ 0, \text{ sinon} \end{cases}$$

$$b_j = \begin{cases} h, \forall j \in \{1, ..., Nel - 2\} \\ 0, \text{ sinon} \end{cases}$$