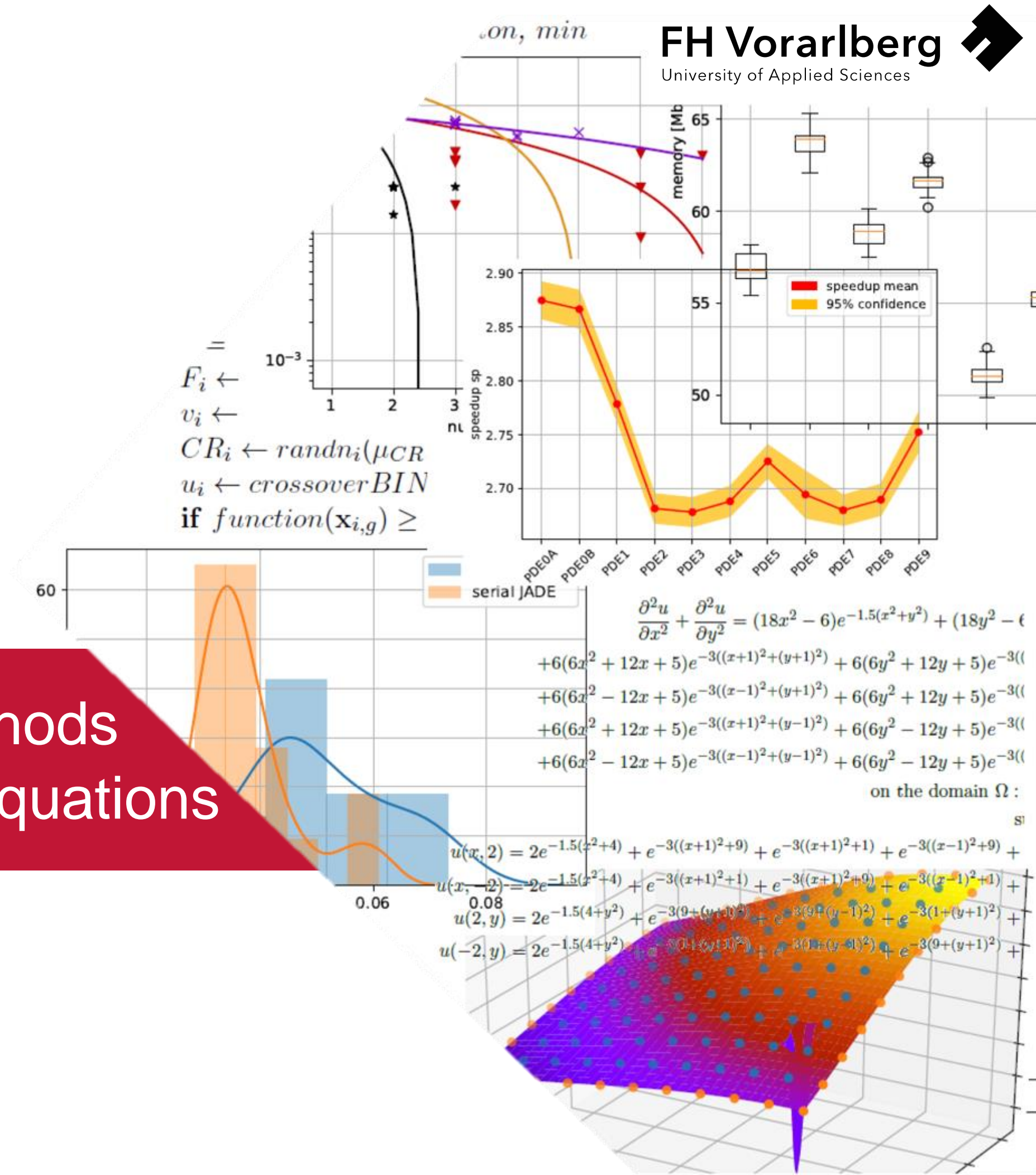


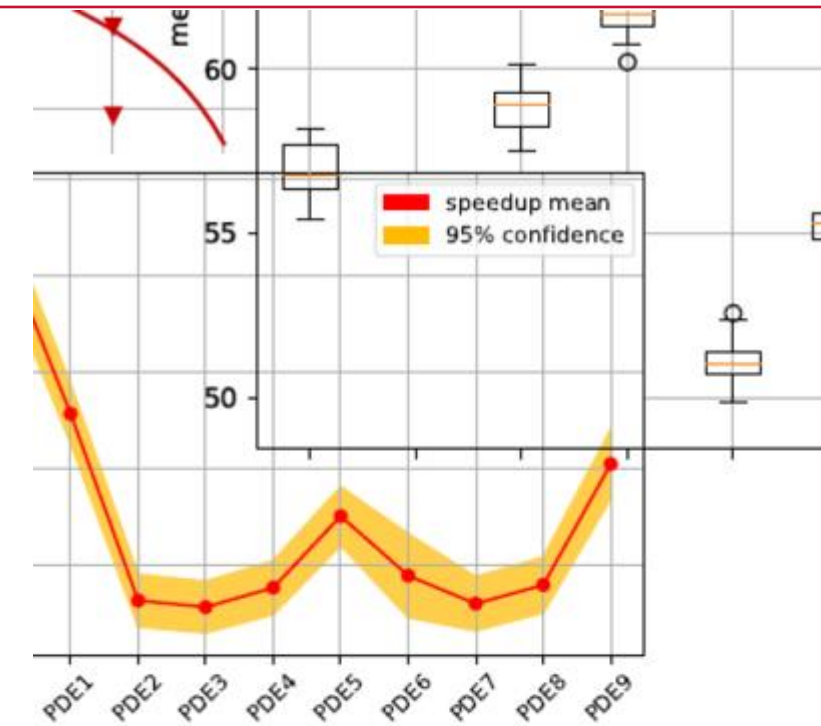
# Computational Intelligence Methods for Solving Partial Differential Equations

Name: Nicolai Schwartze  
Studiengang: Master Mechatronics  
Semester: 4



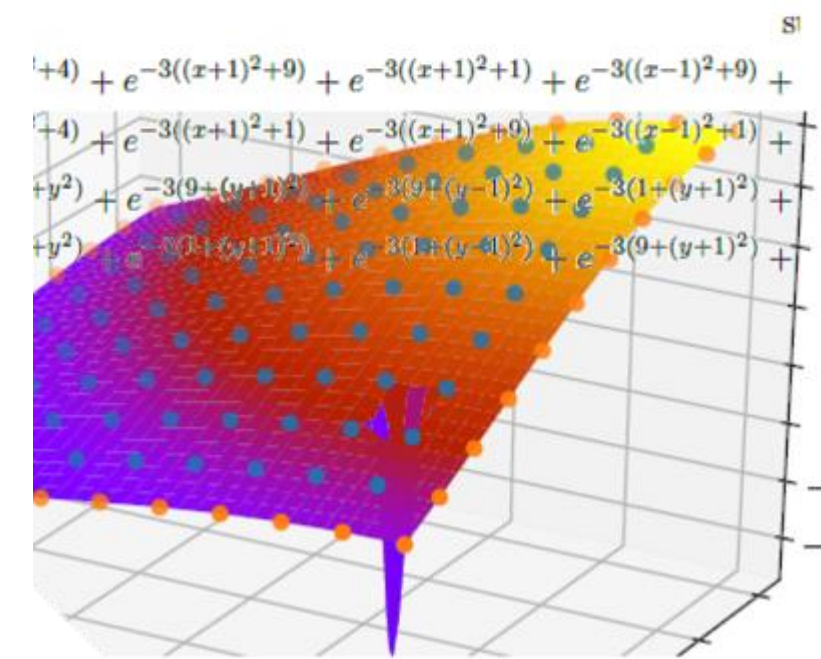
# Inhalt

- ◆ Problembeschreibung
- ◆ Experimentaufbau
- ◆ Serielle JADE
- ◆ Parallele JADE
- ◆ Adaptive Kernel
- ◆ Gauß-Sinus Kernel
- ◆ Schlussfolgerung



$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = (18x^2 - 6)e^{-1.5(x^2+y^2)} + (18y^2 - 6)e^{-1.5(x^2+y^2)} + 12x + 5)e^{-3((x+1)^2+(y+1)^2)} + 6(6y^2 + 12y + 5)e^{-3((x+1)^2+(y+1)^2)} - 12x + 5)e^{-3((x-1)^2+(y+1)^2)} + 6(6y^2 + 12y + 5)e^{-3((x-1)^2+(y+1)^2)} + 12x + 5)e^{-3((x+1)^2+(y-1)^2)} + 6(6y^2 - 12y + 5)e^{-3((x+1)^2+(y-1)^2)} - 12x + 5)e^{-3((x-1)^2+(y-1)^2)} + 6(6y^2 - 12y + 5)e^{-3((x-1)^2+(y-1)^2)}$$

on the domain  $\Omega$  :



# Problembeschreibung: Optimierungsproblem

---

- ♦ Reformulierung der Differentialgleichung zu einem Optimierungsproblem
  - Minimierung des Residuums
  - $x$  wird hier auf  $x \in \mathbb{R}^2$  beschränkt
  - $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$  ist die Domain der Differentialgleichung mit dem Rand  $\partial\Omega$
  - $u(x): \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  ist die Lösung der Differentialgleichung
  - - $Lu(x) = f(x)$  in  $\Omega$
    - $Bu(x) = g(x)$  auf  $\partial\Omega$

L und B sind lineare Differentialoperatoren
  - $R(u(x)) = Lu(x) - f(x)$
  - $R(u(x)) \rightarrow \min$  für  $u(x)$



# Problembeschreibung: Funktionsrepräsentation

- ◆ Approximationen werden als endliche Summe von radialen Basisfunktionen dargestellt

$$u(x) \approx u_{apx}(x) = \sum_{i=0}^N \phi_i(x)$$

- ◆ Es werden zwei Basisfunktionen getestet
  - Gauß Kernel

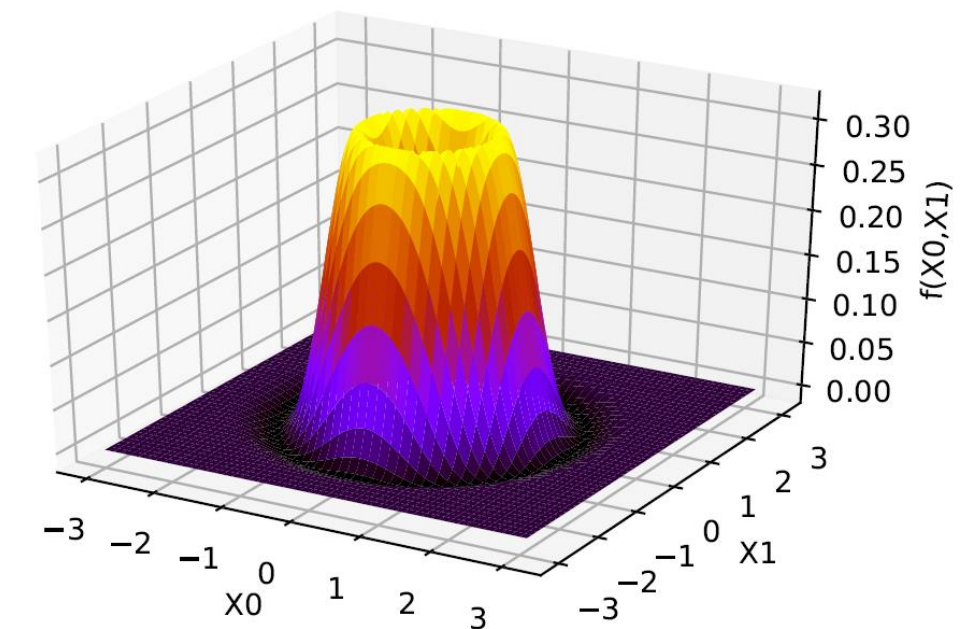
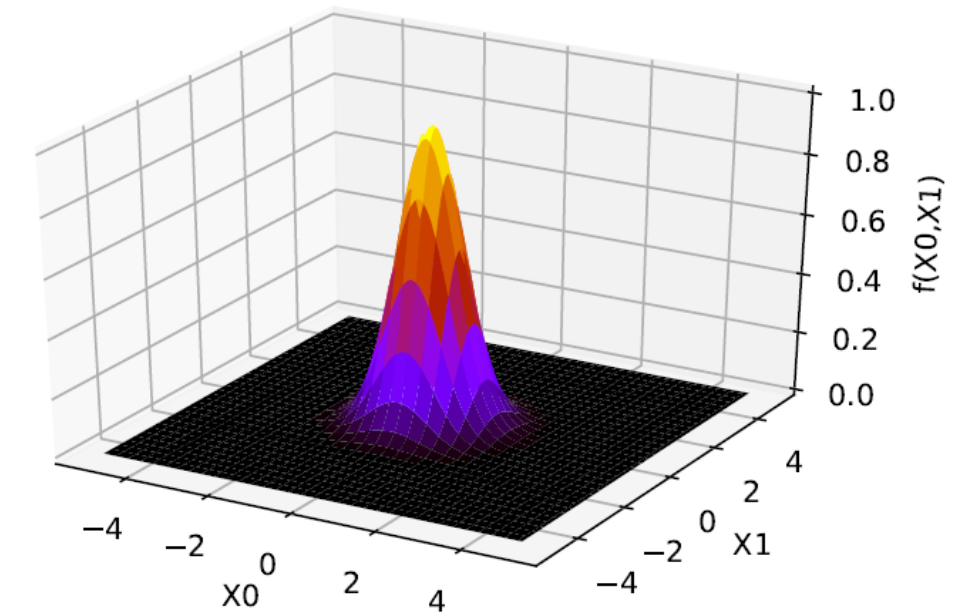
$$gak(x) = \omega e^{-\gamma \|x-c\|^2}$$

$$[\omega_0, \gamma_0, c_{00}, c_{01}, \dots, \omega_i, \gamma_i, c_{i0}, c_{i1}, \dots, \omega_N, \gamma_N, c_{N0}, c_{N1}]^T$$

- Gauß-Sinus Kernel

$$gsk(x) = \omega e^{-\gamma \|x-c\|^2} \sin(f \|x-c\|^2 - \varphi)$$

$$[\omega_0, \gamma_0, c_{00}, c_{01}, f_0, \varphi_0, \dots, \omega_i, \gamma_i, c_{i0}, c_{i1}, f_i, \varphi_i, \dots, \omega_N, \gamma_N, c_{N0}, c_{N1}, f_N, \varphi_N]^T$$

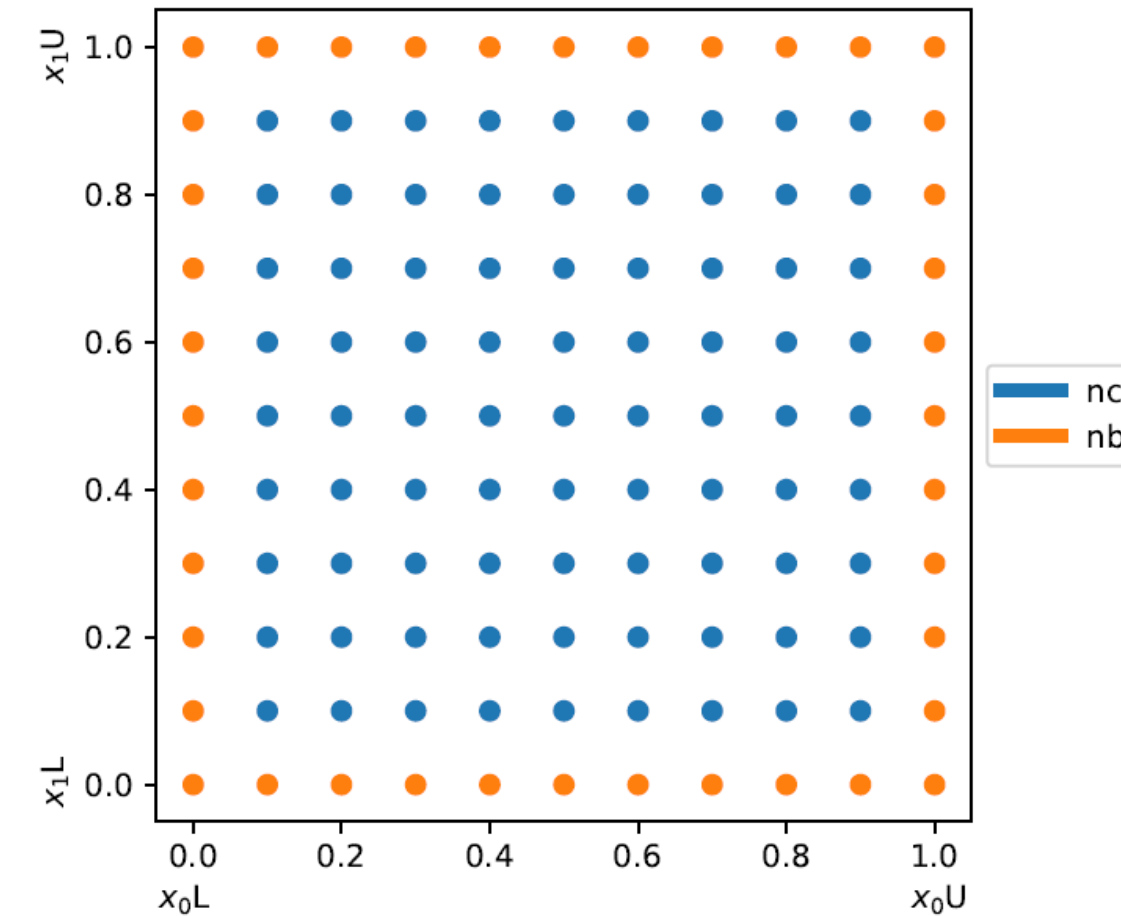


# Problembeschreibung: Fitnessfunktion

- ◆ Basiert auf dem Residuum
- ◆ Weist einer Approximation  $u_{apx}(x)$  einen realen Wert zu
- ◆ Residuum wird für  $u_{apx}(x)$  ausgewertet
  - Finite Anzahl an Collocation Points in der Domain
- ◆ „Using CMAES for solving different types of differential equations“ (Chaquet und Carmona 2019)
- ◆ Fitness Funktion:

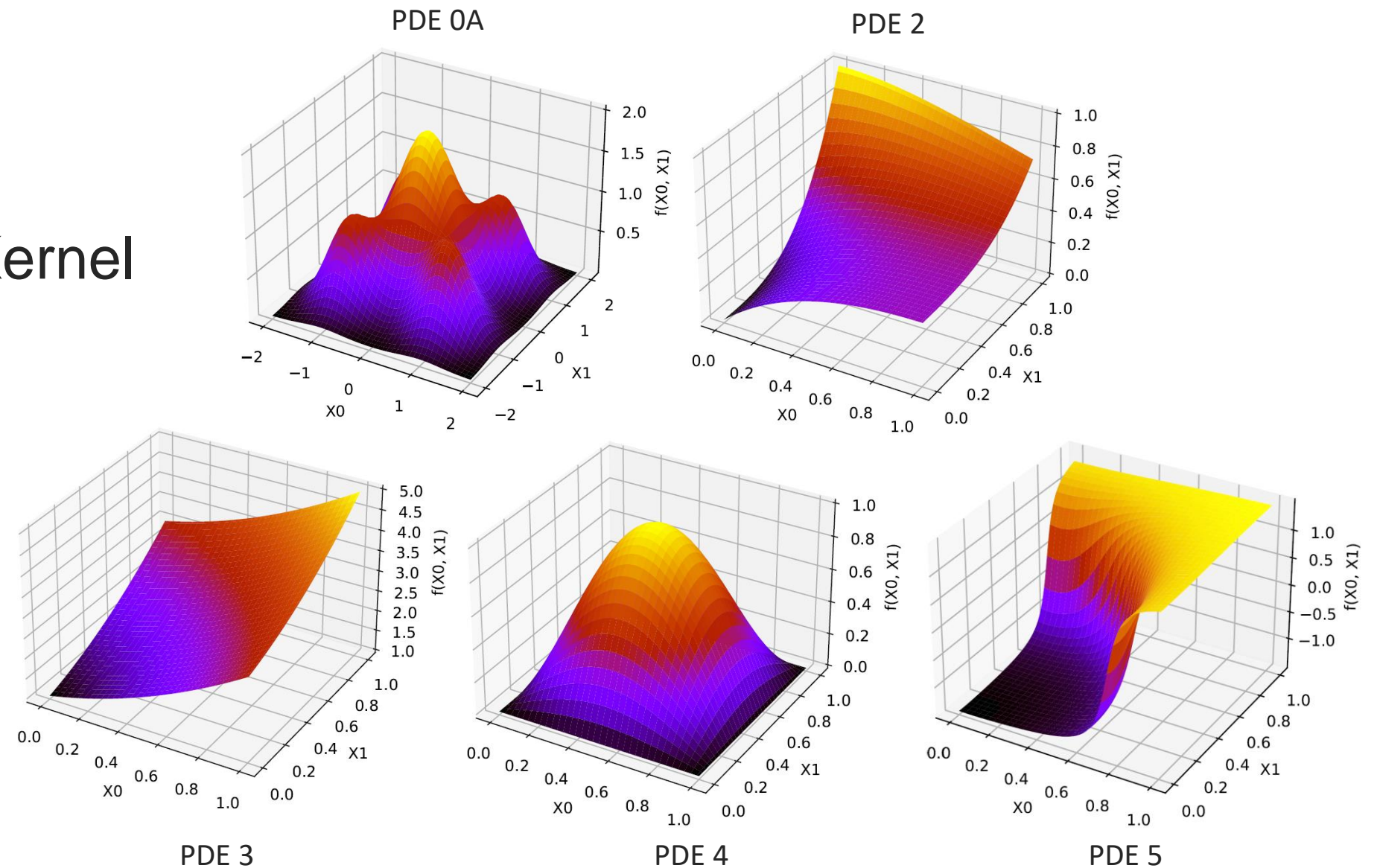
$$F(u_{apx}(x)) = \frac{\sum_{i=1}^{nc} \xi(x_i) [Lu_{apx}(x_i) - f(x_i)]^2 + \phi \sum_{j=1}^{nB} [Bu_{apx}(x_j) - g(x_j)]^2}{(n_C + n_B)}$$

- ◆ Implementierung:  $F\left(\begin{array}{c} \underbrace{u_{apx}(x)} \\ [\omega_i, \gamma_i, c_{i0}, c_{i1}]^T \end{array}\right) : \mathbb{R}^{4N} \rightarrow \mathbb{R}$



# Experimentaufbau: Testbed

- ♦ Testbed bestehend aus 11 PDEs
  - Poisson Gleichungen:  
Laplace Operator wird auf die Lösung angewendet
- ♦ 5 Gleichungen von Bedeutung:
  - PDE 0A: Summe von 5 Gauß Kernel
  - PDE 2: Aus Literatur
  - PDE 3: Aus Literatur
  - PDE 4: Aus NIST Testbed
  - PDE 5: Aus NIST Testbed

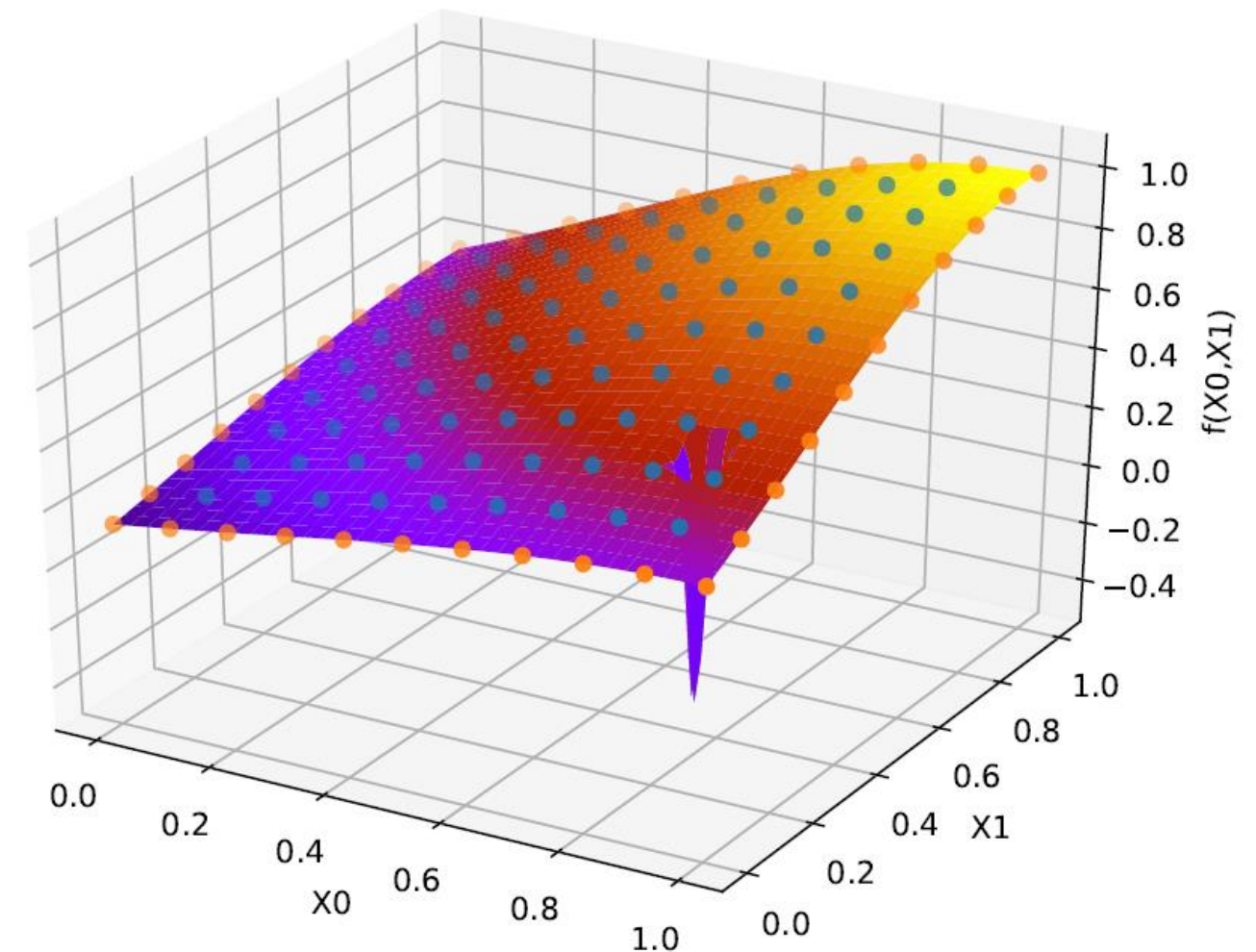




# Experimentaufbau: Vergleiche

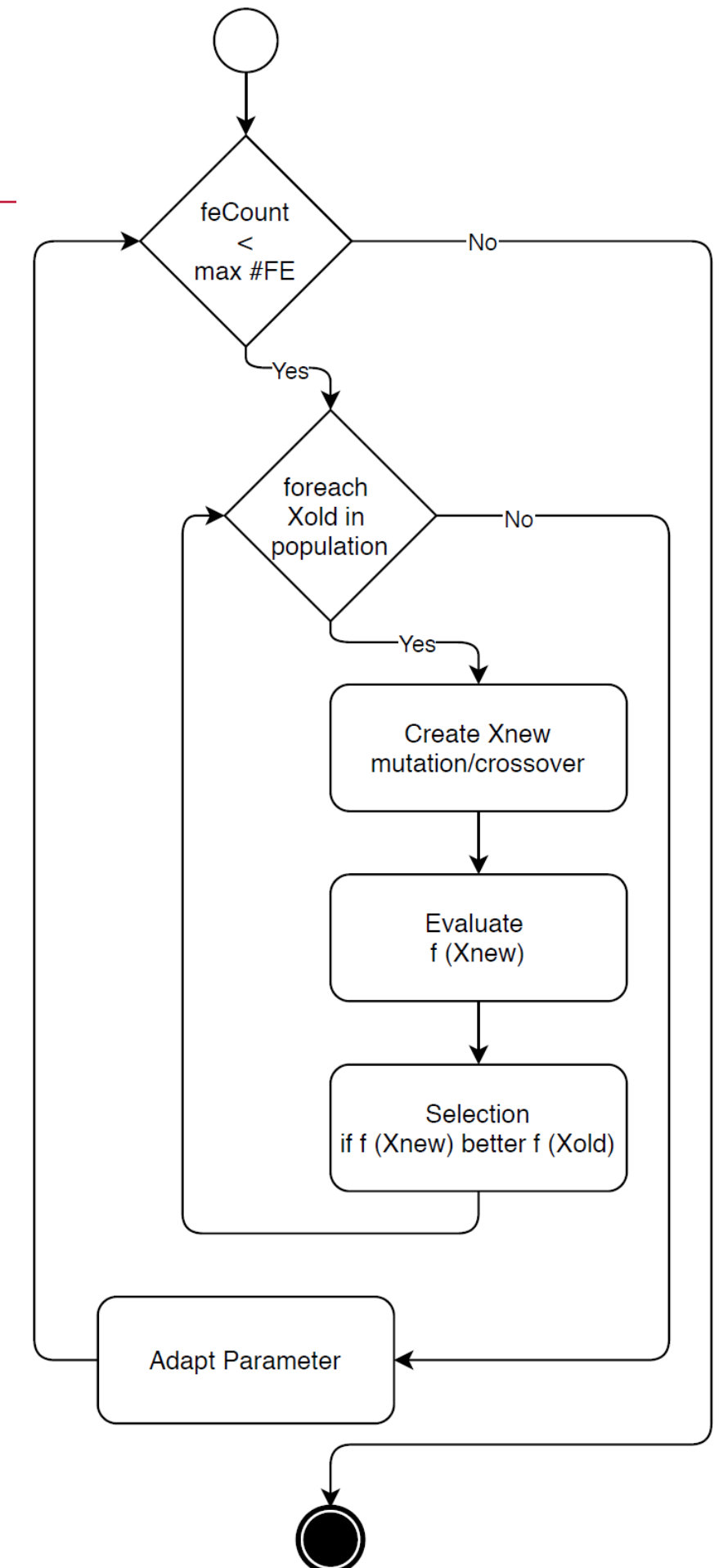
- ◆ Es werden 3 Eigenschaften verglichen:
  - Benötigte Zeit
  - Allokierter Speicher
  - Qualität der Approximation
- ◆ Vergleich mit Finite Elemente Solver NGSolve
- ◆ Vergleich mit Ergebnissen aus der Literatur
- ◆ Statistische Auswertung: 20 Replikationen  
Wilcoxon Ranksum Test mit  $\alpha = 0.05$

$$\|u_{ext} - u_{apx}\| = \sqrt{\int_{\Omega} \left(u_{ext}(x) - u_{apx}(x)\right)^2 dx}$$



# Serielle JADE: Hypothese

- ♦ JADE ist ein evolutionäres Optimierungsverfahren
  - Mutation/Crossover
  - Evaluierung
  - Selektion
- ♦ Dasselbe Experiment wie in „Chaquet und Carmona 2019“
  - JADE statt CMAES
  - geringe Parameteränderungen
- ♦ Ist es möglich, mit JADE ähnlich gute Ergebnisse wie in der Literatur zu erreichen?

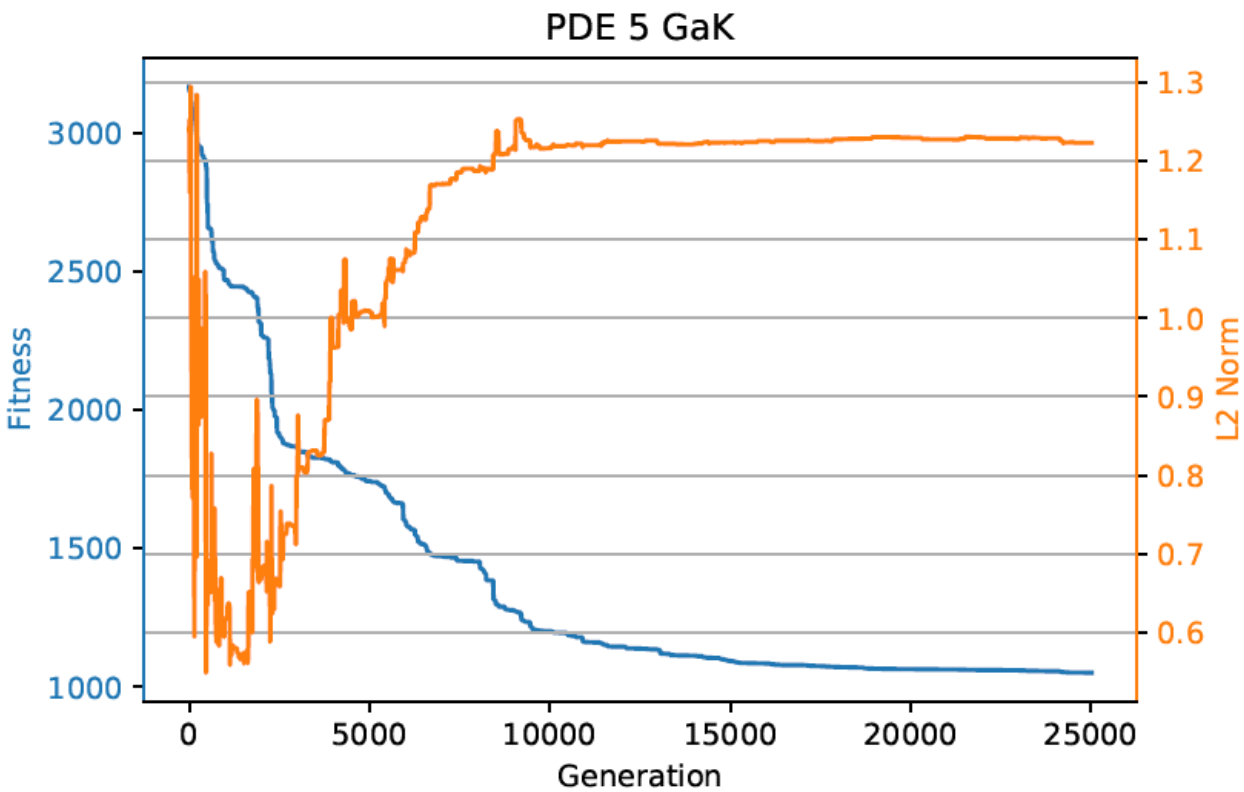




# Serielle JADE: Ergebnisse

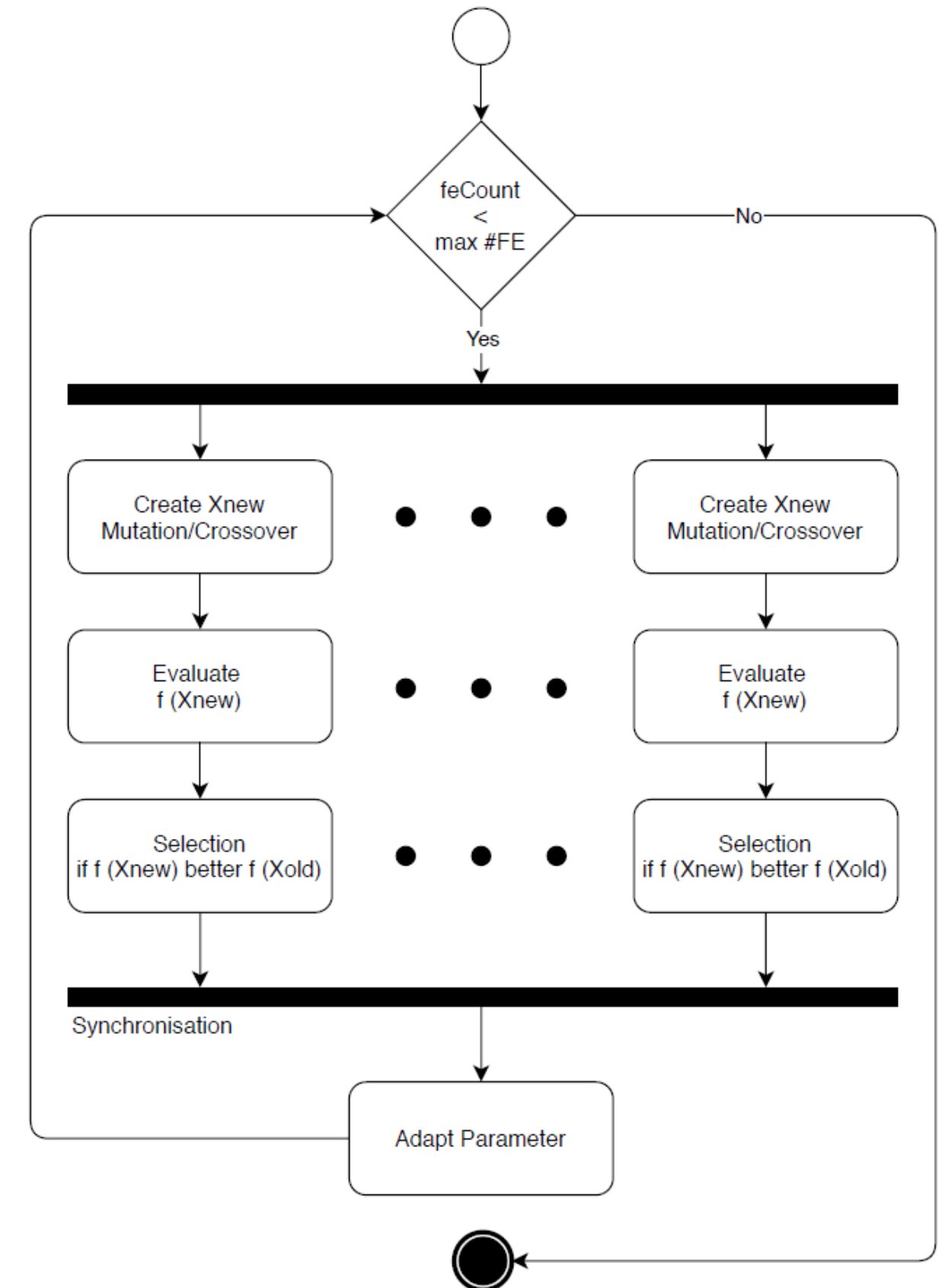
Name	10 <sup>4</sup> #FE		10 <sup>6</sup> #FE		Wilcoxon
	mean	median	mean	median	
PDE 0A	1.9415 ± 0.3321	1.8844	0.6596 ± 0.5510	0.9285	sig. besser
PDE 2	0.0890 ± 0.0334	0.0760	0.0257 ± 0.0140	0.0224	sig. besser
PDE 3	0.2409 ± 0.1051	0.2309	0.0328 ± 0.0169	0.0285	sig. besser
PDE 4	0.1102 ± 0.0367	0.0985	0.0378 ± 0.0083	0.0352	sig. besser
PDE 5	0.6645 ± 0.1930	0.6263	1.1968 ± 0.0286	1.2056	sig. schlechter

Paper	Parameter	RMSE PDE 2	RMSE PDE 3
Chaquet and Carmona 2019	4 kernel max #FE=10 <sup>6</sup> 50 replications	(1.75 ± 1.14)10 <sup>-4</sup>	(1.09 ± 0.846)10 <sup>-5</sup>
Chaquet and Carmona 2012	10 harmonics max #FE = $G \cdot \lambda = 1.2 \cdot 10^6$ 10 replications	(6.37 ± 0.733)10 <sup>-3</sup>	(5.90 ± 0.799)10 <sup>-3</sup>
Panagant and Bureerat 2014	unknowns: N/A #FE=5 · 10 <sup>5</sup> replications: N/A	7.25610 <sup>-4</sup>	9.48910 <sup>-6</sup>
serial memetic JADE	5 kernel max #FE = 10 <sup>6</sup> 20 replications	(2.9798 ± 1.5541)10 <sup>-2</sup>	(3.8225 ± 1.9438)10 <sup>-2</sup>



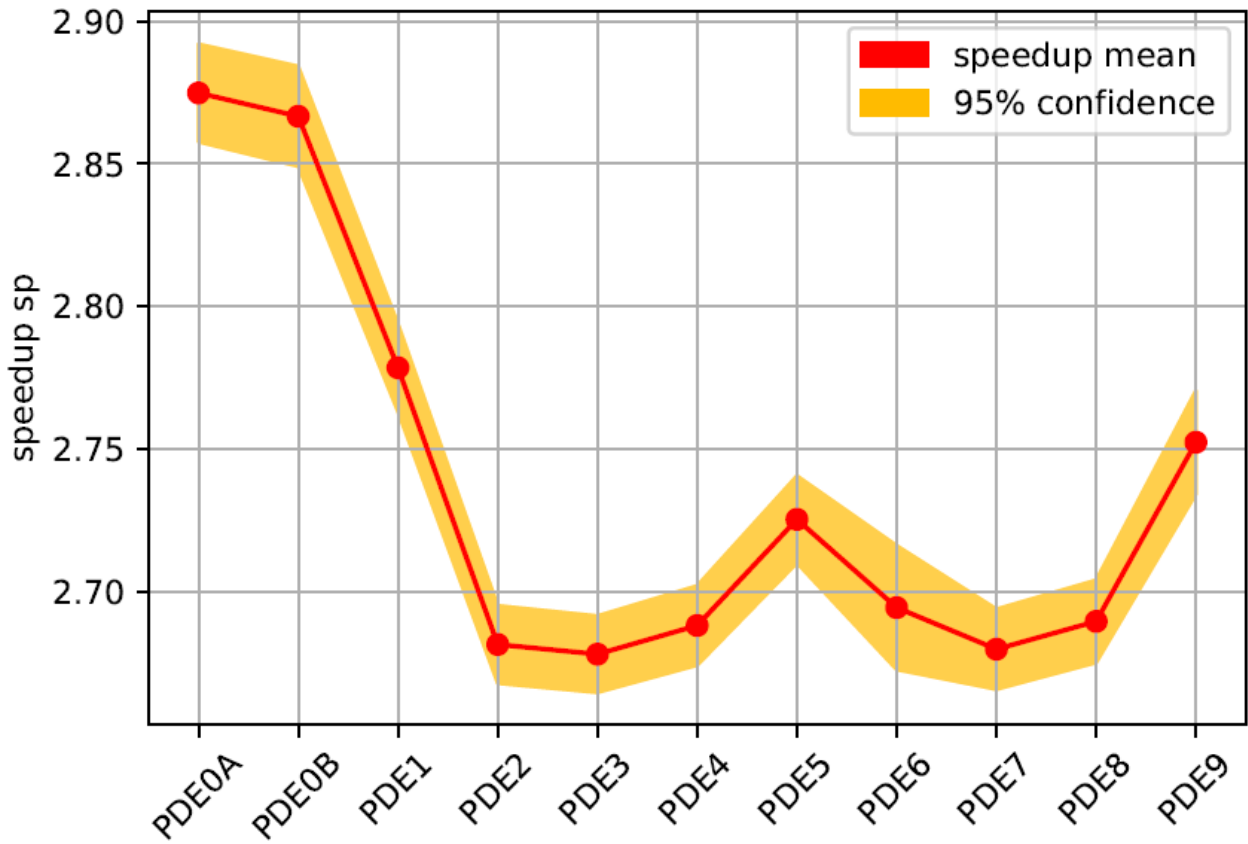
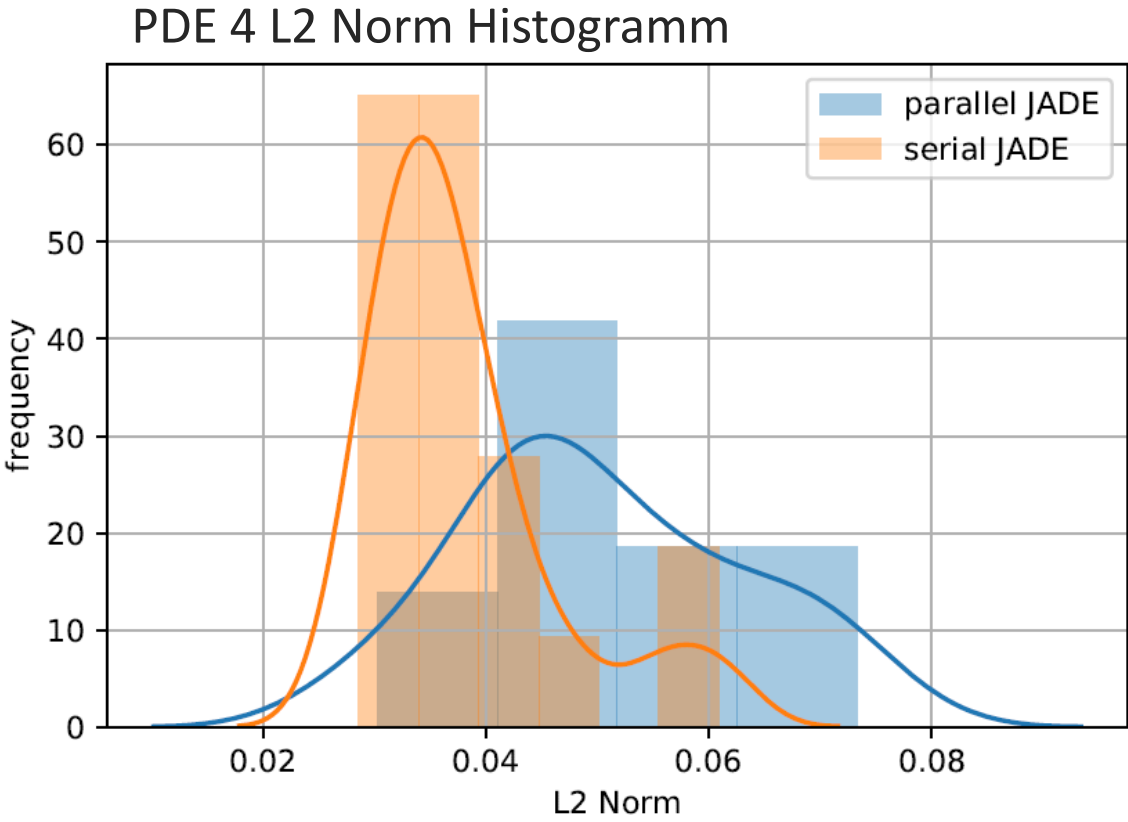
# Parallele JADE: Hypothese

- ◆ Parallele Ausführung von JADE
- ◆ Die innere Iteration durch die Population wird parallelisiert
- ◆ Geringfügige Änderung des Algorithmus:
  - Die Informationen stehen erst nach der Synchronisation der Prozesse zur Verfügung
- ◆ Wie unterscheiden sich die Ergebnisse des parallelen und des seriellen Algorithmus?



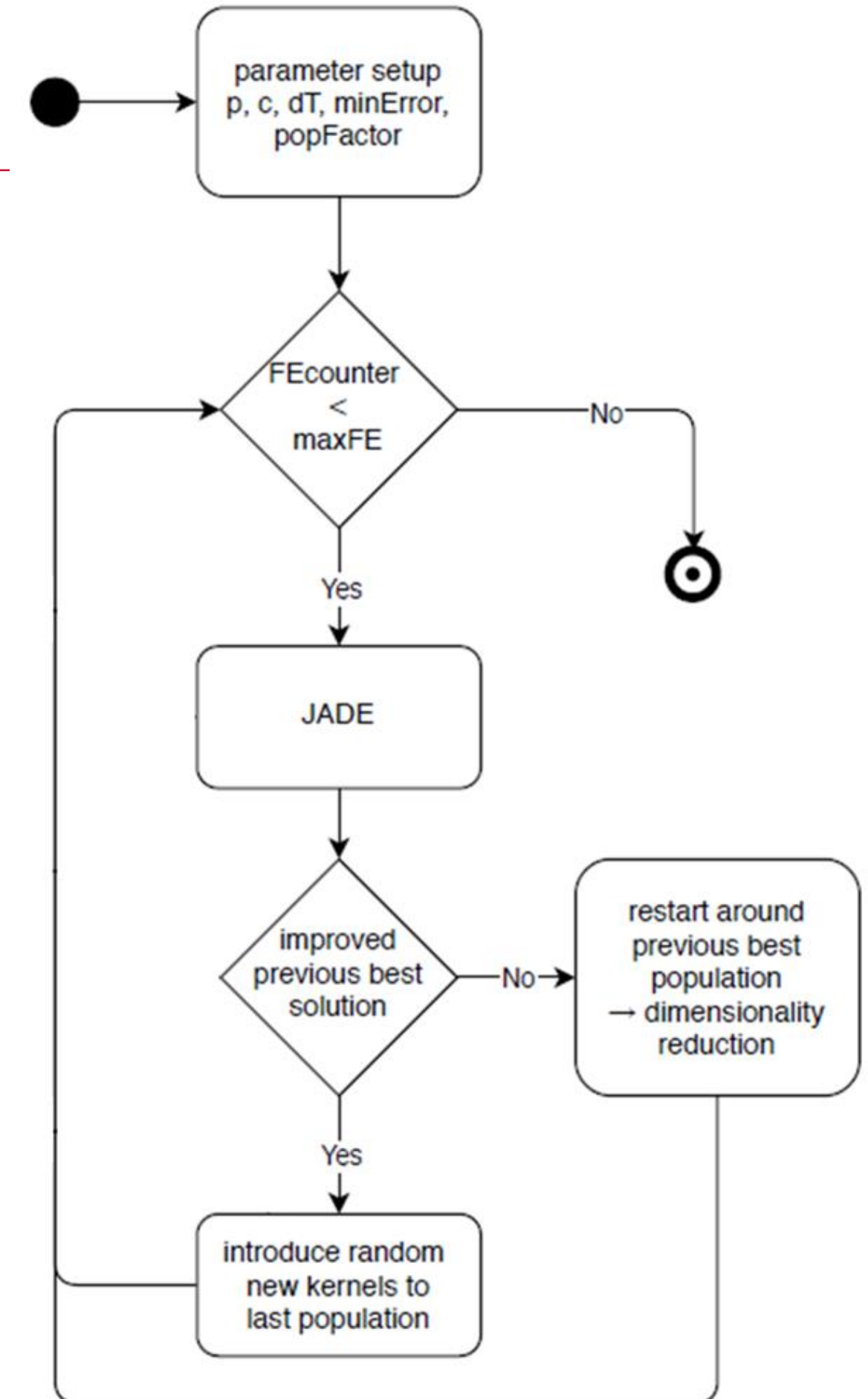
# Parallele JADE: Ergebnisse

Name	serielle JADE		parallele JADE		Wilcoxon
	mean	median	mean	median	
PDE 0A	0.6596 ± 0.5510	0.9285	0.6939 ± 0.6635	0.9243	unsig. unentscheidend
PDE 2	0.0257 ± 0.0140	0.0224	0.0300 ± 0.0157	0.0255	unsig. schlechter
PDE 3	0.0328 ± 0.0169	0.0285	0.0371 ± 0.0206	0.0295	unsig. schlechter
PDE 4	0.0378 ± 0.0083	0.0352	0.0505 ± 0.0121	0.0481	sig. schlechter
PDE 5	1.1968 ± 0.0286	1.2056	1.2030 ± 0.0465	1.2053	unsig. unentscheidend



# Adaptive Kernel: Hypothese

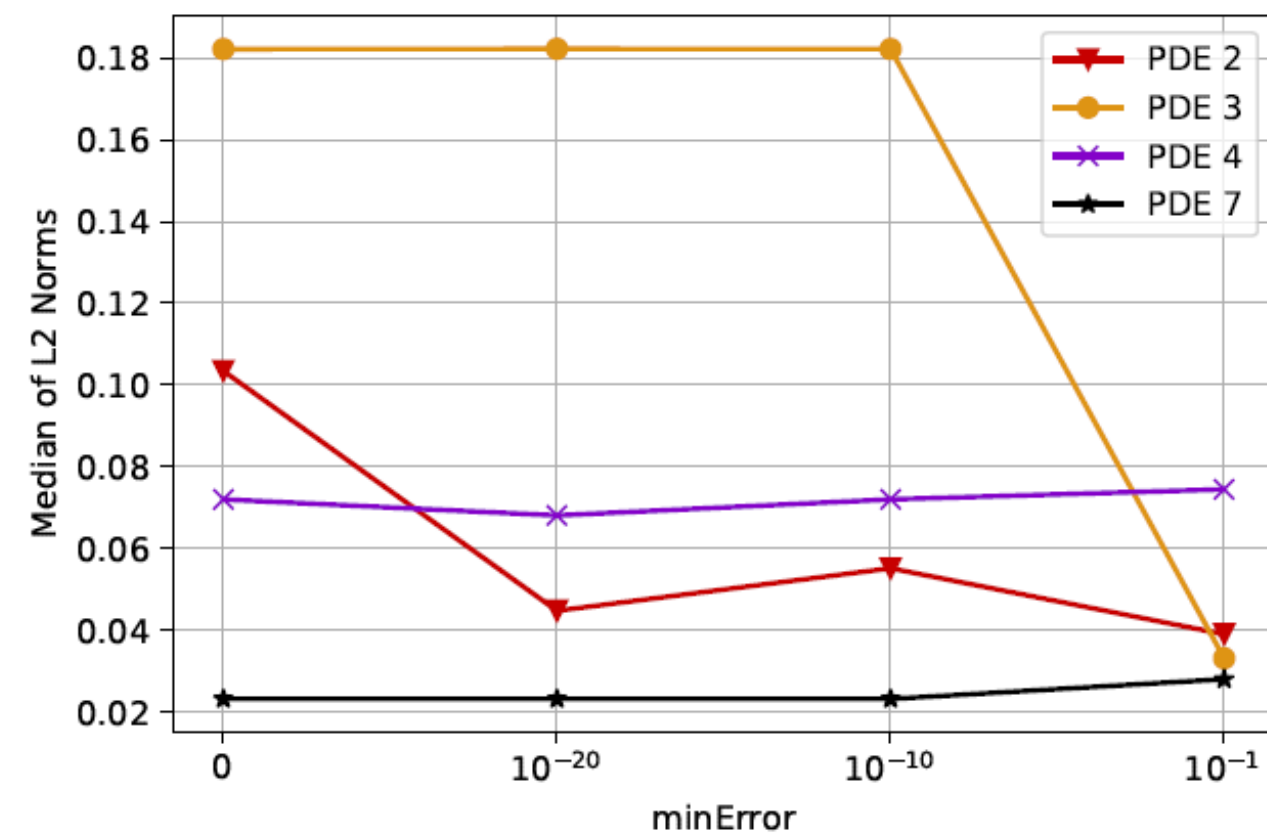
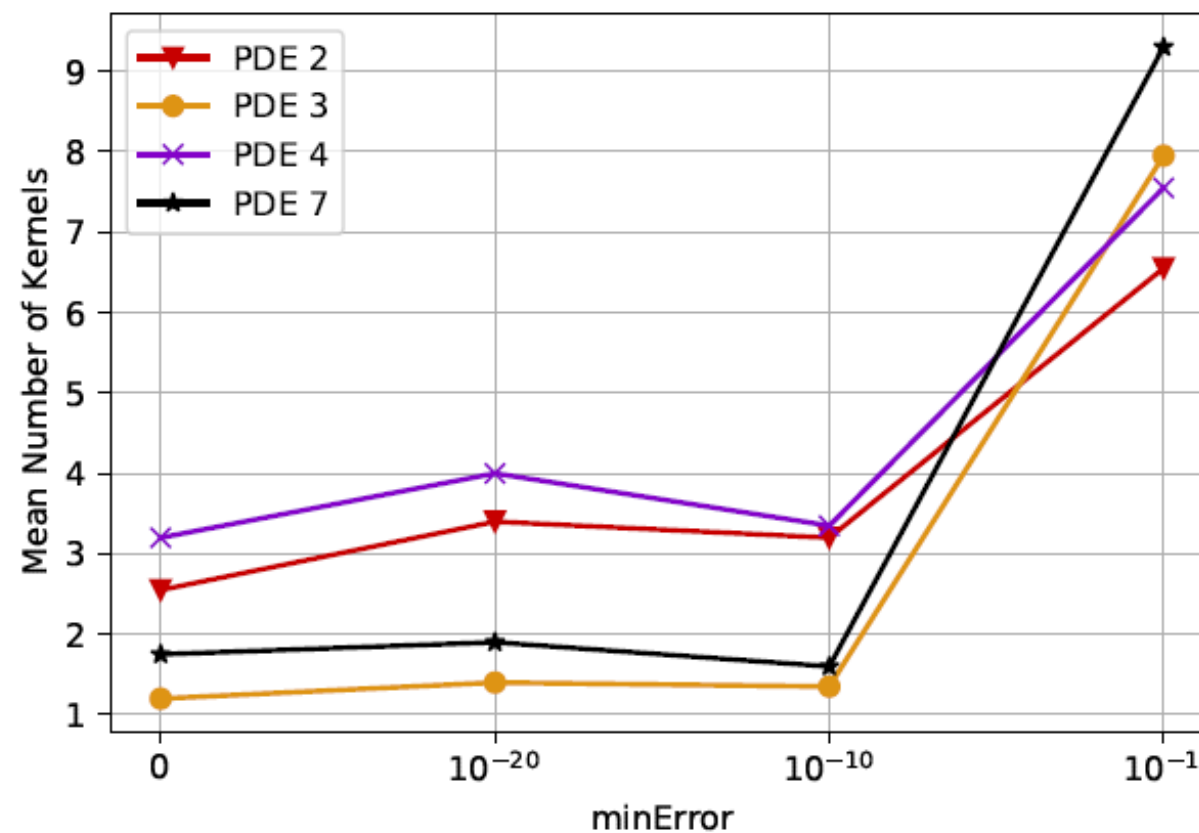
- ♦ Konvergenzbasierte Terminierung von JADE notwendig:
  - unveränderter Funktionswert über Generationen
- ♦ Adaptives Vorgehen:
  - Beginn mit einem Kernel, geringe Dimension
  - Erhöhe Anzahl der Kernel bis die Lösung nicht mehr verbessert werden kann
- ♦ Kann dieses adaptive Verhalten der Kernel die Ergebnisse verbessern?





# Adaptive Kernel: Ergebnisse

Name	parallel JADE		adaptive Kernel		Wilcoxon
	mean	median	mean	median	
PDE 0A	$0.6939 \pm 0.6635$	0.9243	$9.694\text{E-}16 \pm 1.486\text{E-}16$	$9.255\text{E-}16$	sig. besser
PDE 2	$0.0300 \pm 0.0157$	0.0255	$0.0735 \pm 0.0358$	0.1034	sig. schlechter
PDE 3	$0.0371 \pm 0.0206$	0.0295	$0.1731 \pm 0.0395$	0.1822	sig. schlechter
PDE 4	$0.0505 \pm 0.0121$	0.0481	$0.0707 \pm 0.0053$	0.0720	sig. schlechter
PDE 5	$1.2030 \pm 0.0465$	1.2053	$122.6312 \pm 372.5676$	1.1643	unsig. un schlüssig

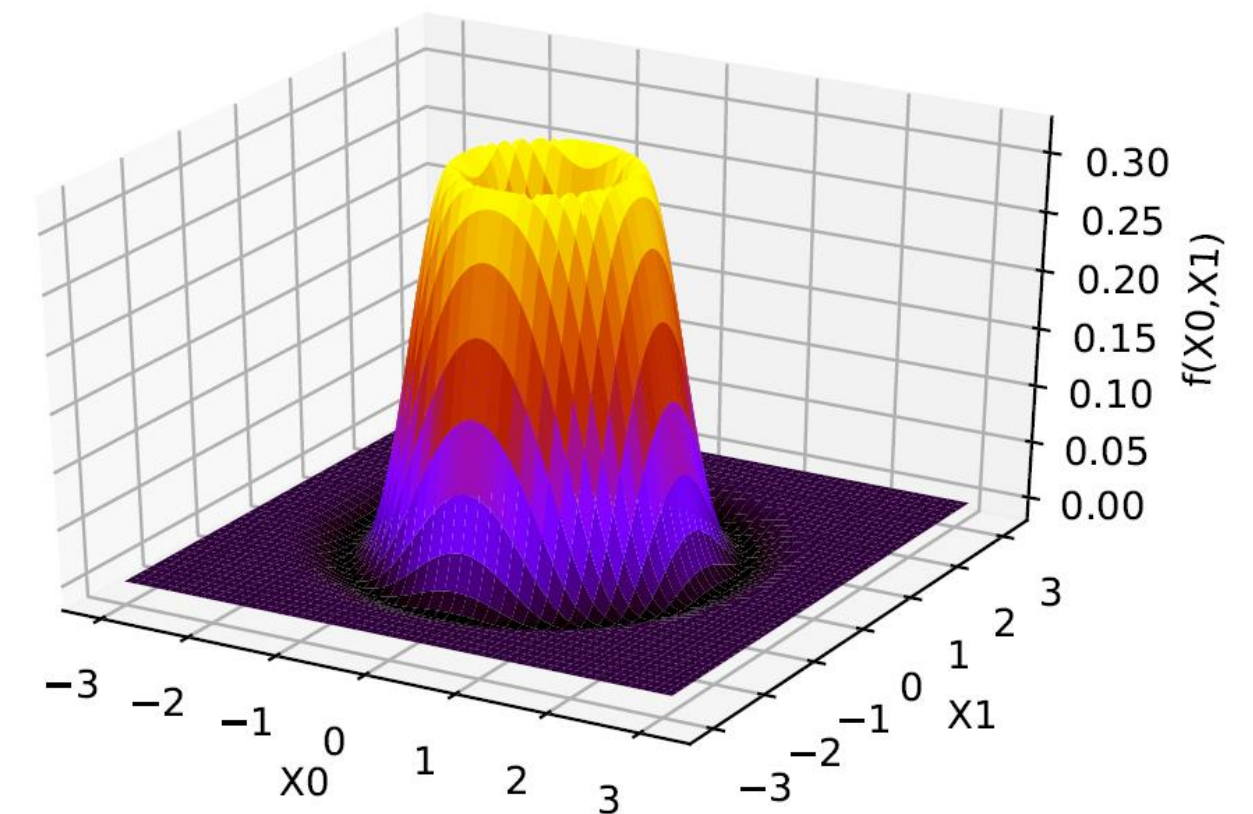


# Gauß-Sinus Kernel: Hypothese

- ♦ Fitnessfunktion wird optimiert, reflektiert aber nicht das eigentliche Qualitätsmerkmal

- Fitnessfunktion muss angepasst werden  
→ einfache Möglichkeit: anderer Kerneotyp

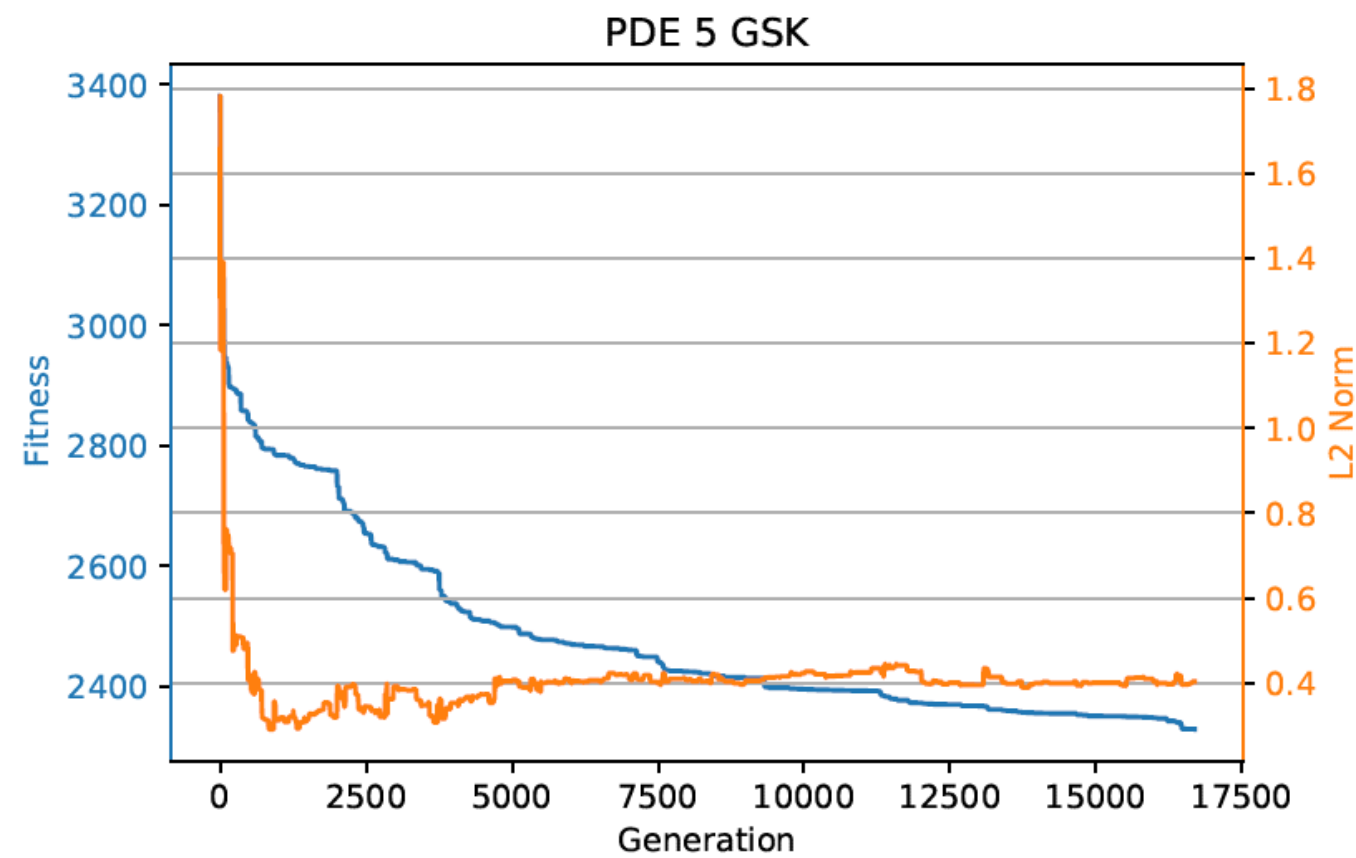
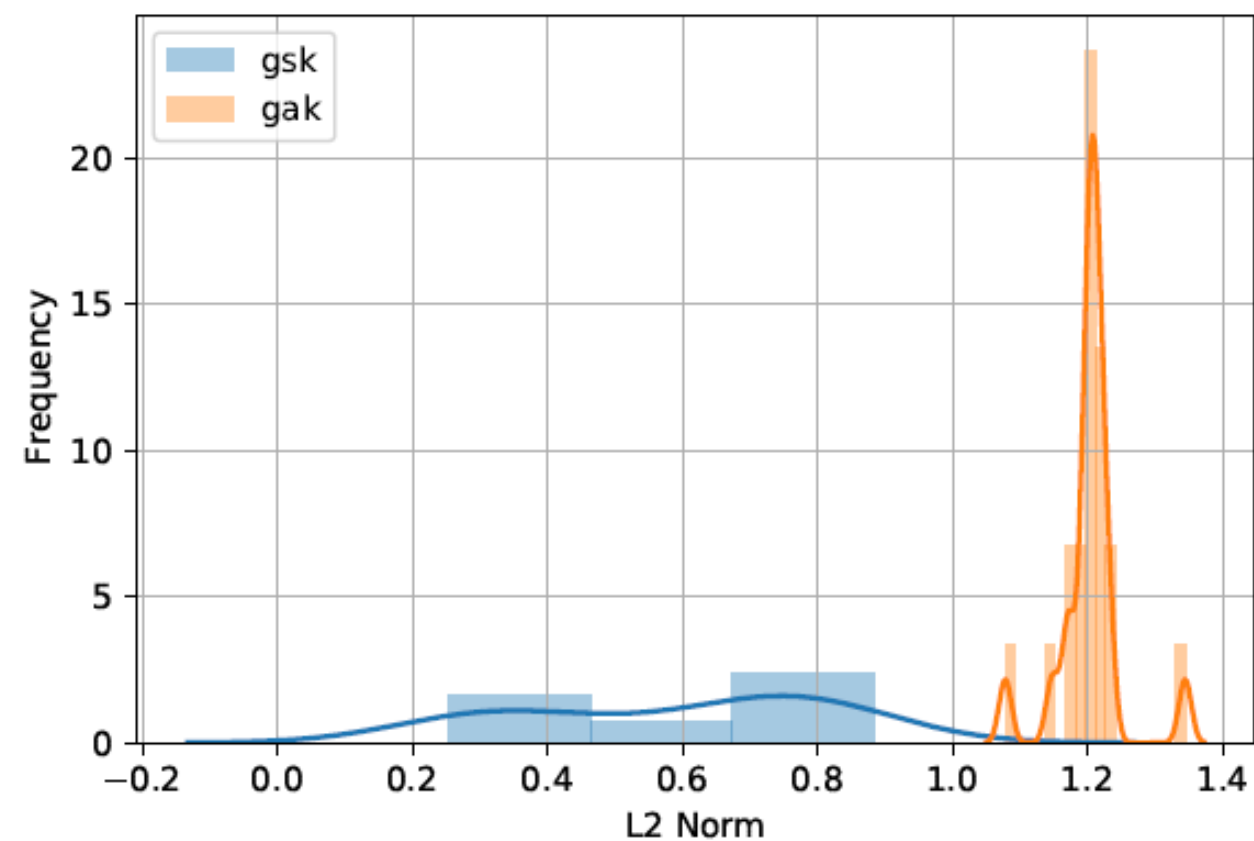
- ♦  $gsk(x) = \omega e^{-\gamma \|x-c\|^2} \sin(f \|x-c\|^2 - \varphi)$



- ♦ Kann der neue Gauß-Sinus Kernel das Problem der gegensätzlichen Fitness und L2 Norm auf PDE 5 lösen?

# Gauß-Sinus Kernel: Ergebnisse

Name	Gauß Kernel		Gauß-Sinus Kernel		Wilcoxon
	mean	median	mean	median	
PDE 0A	$0.6939 \pm 0.6635$	0.9243	$0.8106 \pm 0.7929$	0.6765	unsig. unschlüssig
PDE 2	$0.0300 \pm 0.0157$	0.0255	$0.0448 \pm 0.0224$	0.0416	unsig. schlechter
PDE 3	$0.0371 \pm 0.0206$	0.0295	$0.0263 \pm 0.0111$	0.0269	unsig. besser
PDE 4	$0.0505 \pm 0.0121$	0.0481	$0.0470 \pm 0.0078$	0.0458	unsig. besser
PDE 5	$1.2030 \pm 0.0465$	1.2053	$0.5860 \pm 0.2149$	0.6841	sig. besser

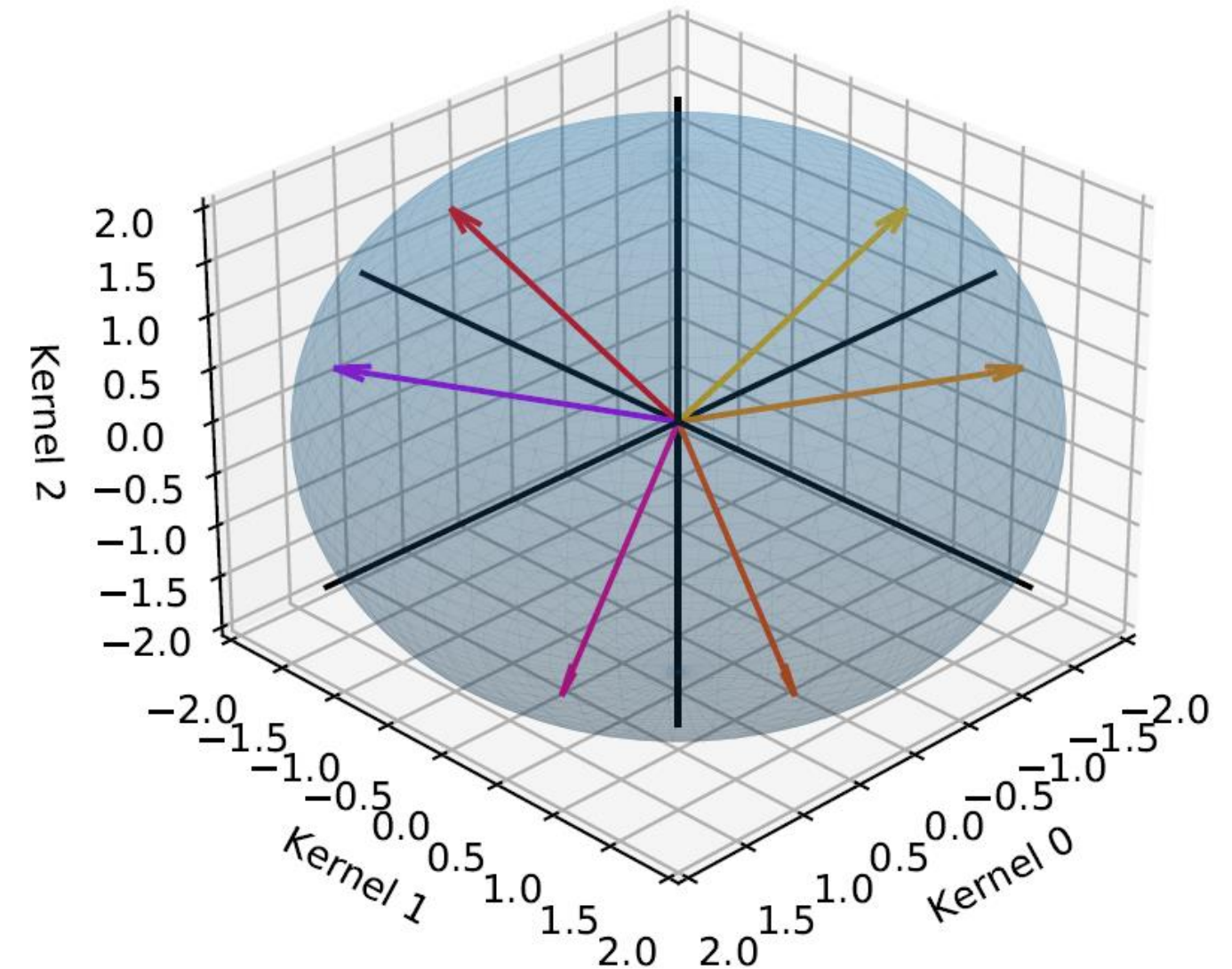


# Schlussfolgerung

- ♦ JADE produziert schlechtere Ergebnisse als vergleichbare Algorithmen aus der Literatur
- ♦ CMAES auf diesem Testbed verwenden
- ♦ Es kann eine radiale Symmetrie der Fitnessfunktion festgestellt werden, das könnte der Entwicklung neuer Algorithmen dienen

$$u(x) \approx u_{apx}(x) = \sum_{i=0}^N \phi_i(x)$$

$$\left[ \overrightarrow{\text{kernel}_0} \, , \dots \, \overleftarrow{\text{kernel}_i} \, , \dots \, \overleftarrow{\text{kerenl}_N} \right]^T$$







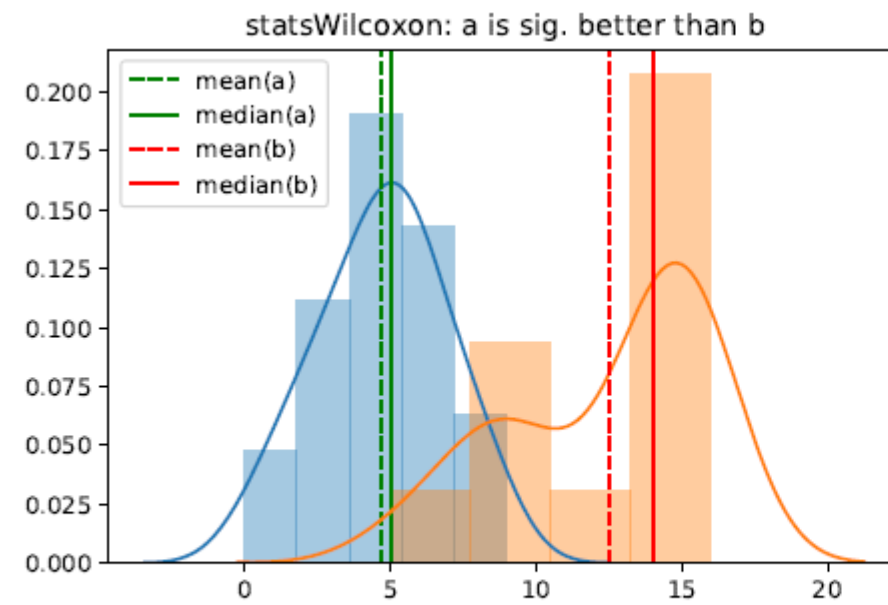
[www.fhv.at](http://www.fhv.at)

Name: Nicolai Schwartze

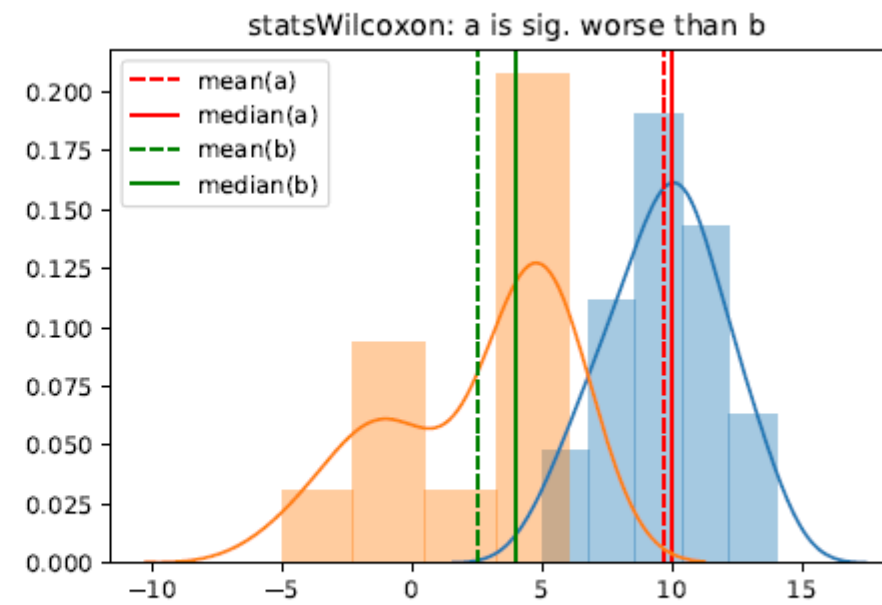
Kontakt: [nicolai.schwartze@students.fhv.at](mailto:nicolai.schwartze@students.fhv.at)

Studiengang, Semester: Master Mechatronics, 4

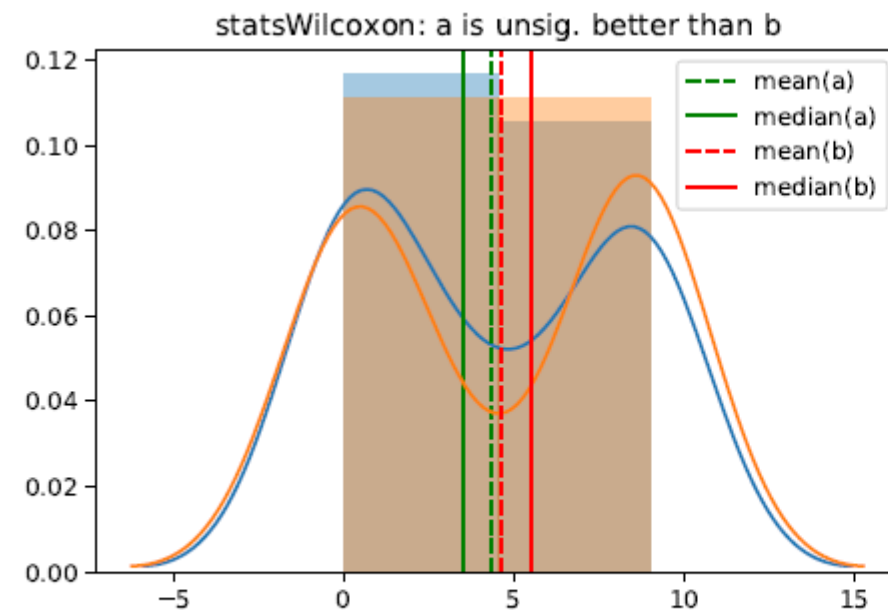
# Statistische Signifikanz: Wilcoxon Test



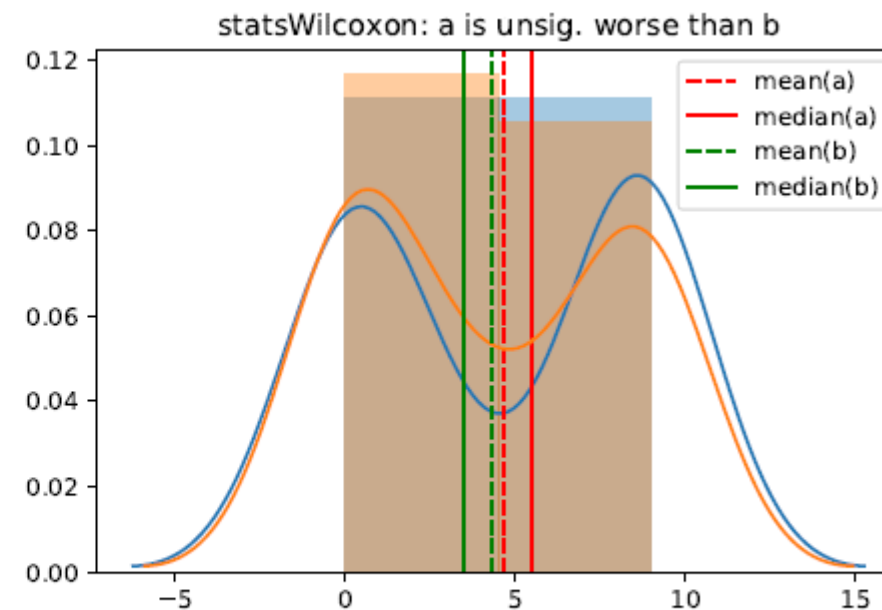
(a) A is significantly better than B



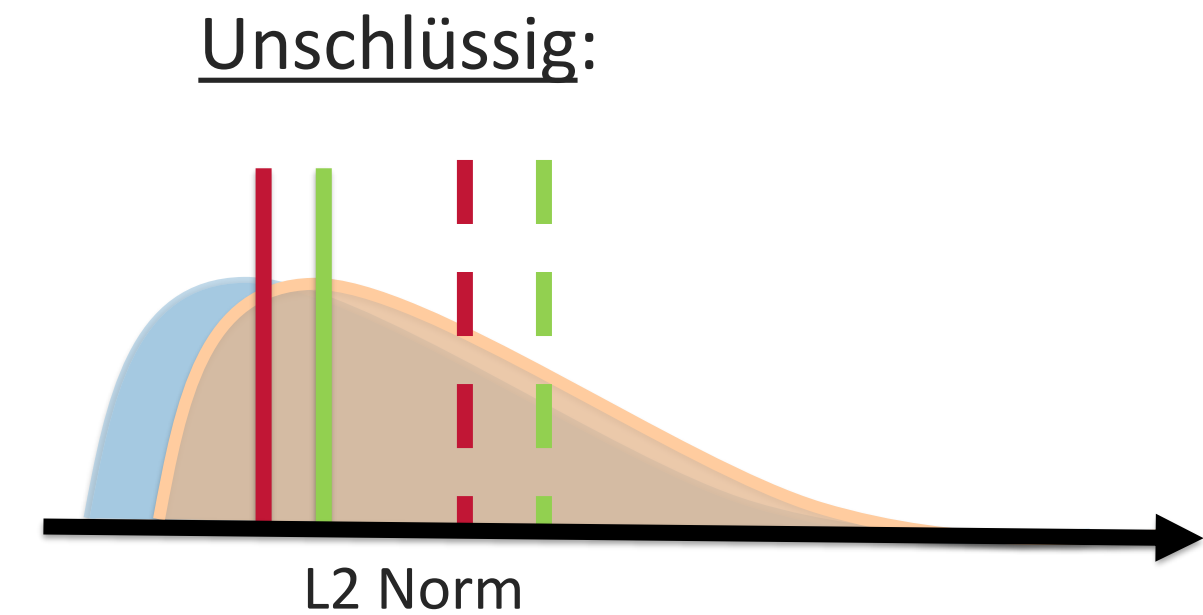
(b) A is significantly worse than B



(c) A is unsignificantly better than B

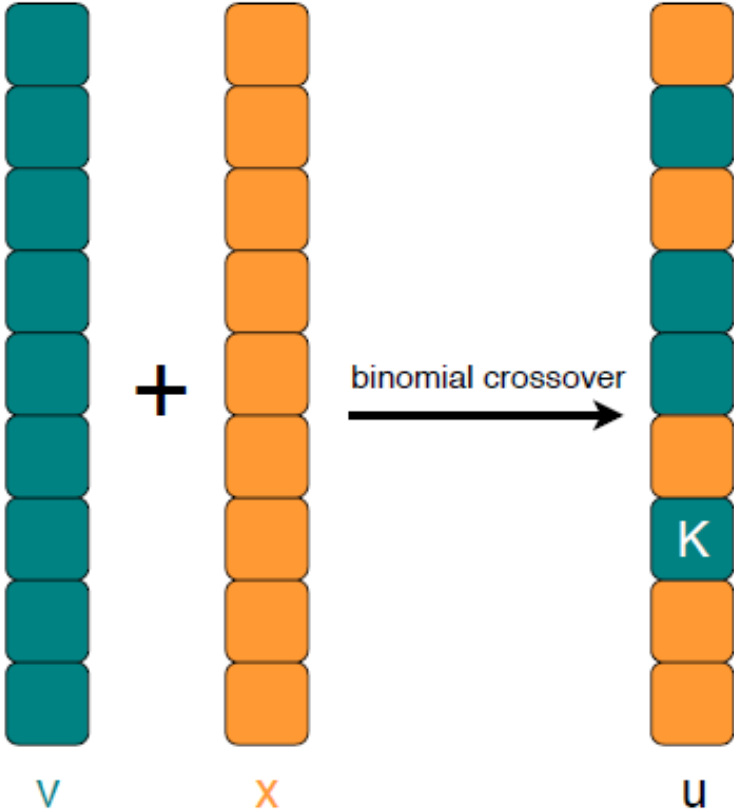
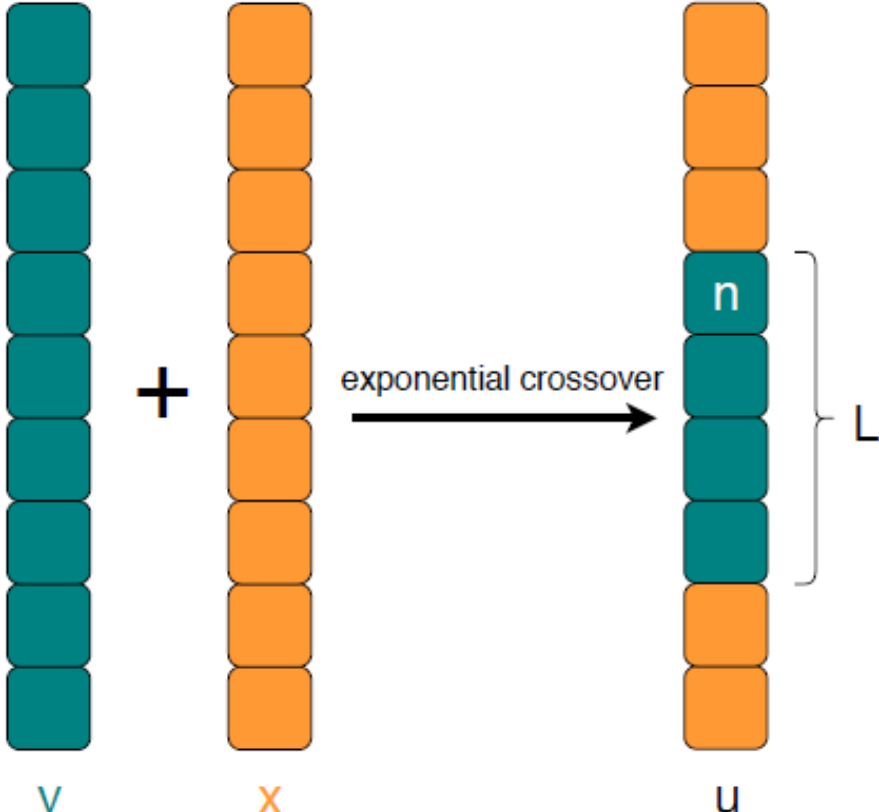


(d) A is unsignificantly worse than B

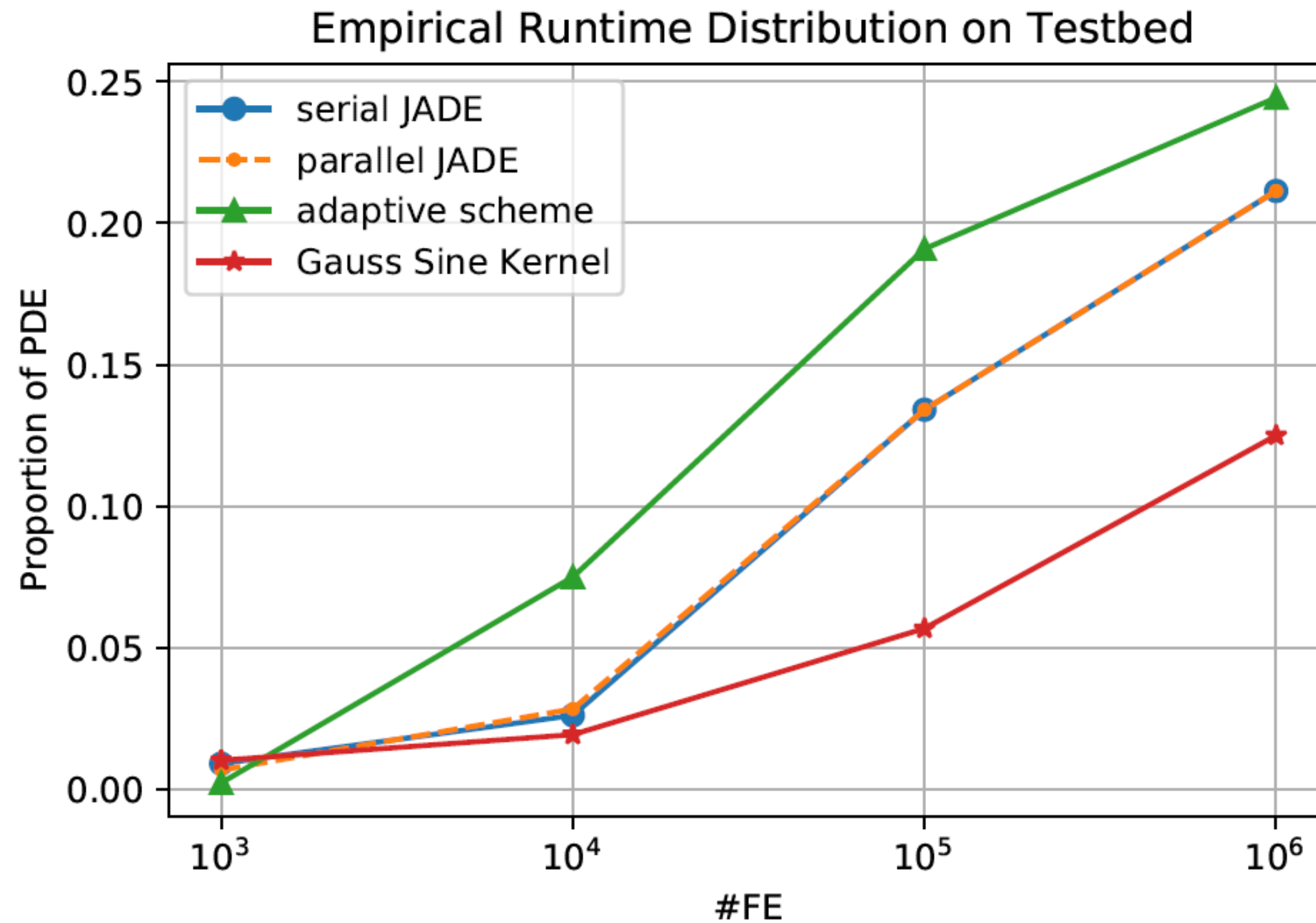


# Pseudocode: Mutation/Crossover

CurrentToPBest	$v_{i,g} = x_{i,g} + F_i \cdot (x_{best,g}^p - x_{i,g}) + F_i \cdot (x_{r1,g} - x_{r2,g})$
CurrentToPBest with archive	$v_{i,g} = x_{i,g} + F_i \cdot (x_{best,g}^P - x_{i,g}) + F_i \cdot (x_{r1,g} - \tilde{x}_{r2,g})$

binomial crossover	exponential crossover
 <p style="text-align: center;"> <math>v</math>      <math>x</math>      <math>u</math> </p>	 <p style="text-align: center;"> <math>v</math>      <math>x</math>      <math>u</math> </p>
$u_j = \begin{cases} v_j, & \text{if } j = K \vee rand[0, 1] \leq CR \\ x_j, & \text{otherwise} \end{cases}$	$u_j = \begin{cases} v_j, & \text{if } j \in \{\langle n \rangle_d, \dots, \langle n + L - 1 \rangle_d\} \\ x_j, & \text{otherwise} \end{cases}$

# Expected Runtime Distribution



L2 Norm auf allen  
11 PDEs zu einem  
Targetvalue von:  
0.05  
0.01  
0.005  
0.001



# Pseudocode: JADE

Algorithm A.1: JADE Pseudocode

```
1 Function JADE( $\mathbf{X}_{g=0}, p, c, \text{function}, \text{minError}, \text{maxFE}$ ):  
2    $fValue_{g=0} \leftarrow \text{function}(\mathbf{x}_{g=0})$   
3    $\mu_{CR} \leftarrow 0.5$   
4    $\mu_F \leftarrow 0.5$   
5    $A \leftarrow \emptyset$   
6   while  $fe \leq \text{maxFE}$  do  
7      $g \leftarrow g + 1$   
8      $S_F \leftarrow \emptyset$   
9      $S_{CR} \leftarrow \emptyset$   
10    for  $i = 1$  to  $NP$  do  
11       $F_i \leftarrow \text{randc}_i(\mu_F, 0.1)$   
12       $v_i \leftarrow \text{mutationCurrentToPBest1}(\mathbf{x}_{i,g}, A, fValue_g, F_i, p)$   
13       $CR_i \leftarrow \text{randn}_i(\mu_{CR}, 0.1)$   
14       $u_i \leftarrow \text{crossoverBIN}(\mathbf{x}_{i,g}, v_i, CR_i)$   
15      if  $\text{function}(\mathbf{x}_{i,g}) \geq \text{function}(\mathbf{u}_{i,g})$  then  
16         $\mathbf{x}_{i,g+1} \leftarrow \mathbf{x}_{i,g}$   
17      end  
18      else  
19         $\mathbf{x}_{i,g+1} \leftarrow \mathbf{u}_{i,g}$   
20         $fValue_{i,g+1} \leftarrow \text{function}(\mathbf{u}_{i,g})$   
21         $\mathbf{x}_{i,g} \rightarrow \mathbf{A}$   
22         $CR_i \rightarrow S_{CR}$   
23         $F_i \rightarrow S_F$   
24      end  
25    end  
26    // resize  $A$  to size of  $\mathbf{x}_g$   
27    if  $|A| > NP$  then  
28       $A \leftarrow A \setminus A_{rand_i}$   
29    end  
30     $fe \leftarrow fe + \text{size}(\mathbf{X})$   
31     $\mu_{CR} \leftarrow (1 - c) \cdot \mu_{CR} + c \cdot \text{arithmeticMean}(S_{CR})$   
32     $\mu_F \leftarrow (1 - c) \cdot \mu_F + c \cdot \text{lehmerMean}(S_F)$   
33  end
```

# Pseudocode: memetic JADE

---

---

## Algorithm 5.1: Pseudocode of memetic JADE

---

```
1 Function memeticJADE( $\mathbf{X}$ ,  $funct$ ,  $minErr$ ,  $maxFE$ ):  
2    $dim, popsize \leftarrow size(\mathbf{X})$   
3    $p \leftarrow 0.3$   
4    $c \leftarrow 0.5$   
5    $pop, FE, F, CR \leftarrow JADE(\mathbf{X}, p, c, funct, minErr, maxFE - 2dim)$   
6    $bestIndex = argmin(FE)$   
7    $bestSol = pop[bestIndex]$   
8    $pop, FE = downhill\_simplex(funct, bestSol, minErr, 2dim)$   
9   return  $pop, FE, F, CR$ 
```

---

# Finite Elemente Ergebnisse

---

Problem PDE	L2 Norm
0A	$2.967 \cdot 10^{-5}$
0B	$1.071 \cdot 10^{-5}$
1	$8.004 \cdot 10^{-7}$
2	$3.501 \cdot 10^{-8}$
3	$1.680 \cdot 10^{-9}$
4	$4.764 \cdot 10^{-7}$
5	$6.057 \cdot 10^{-6}$
6	$1.908 \cdot 10^{-7}$
7	$5.203 \cdot 10^{-5}$
8	$3.237 \cdot 10^{-7}$
9	$2.366 \cdot 10^{-7}$

# Ableitungen Kernel

## Gauß Kernel

$$\frac{\partial u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j} = -2 \sum_{i=0}^N \omega_i \gamma_i (x_j - c_{ij}) e^{-\gamma_i r_i^2} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial^2 u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j^2} = \sum_{i=0}^N \omega_i \gamma_i [4\gamma_i (x_j - c_{ij})^2 - 2] e^{-\gamma_i r_i^2} \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial^2 u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j \partial x_k} = 4 \sum_{i=0}^N \omega_i \gamma_i^2 (x_j - c_{ij})(x_k - c_{ik}) e^{-\gamma_i r_i^2} \quad (3.15)$$

## Gauß Sinus Kernel

$$\frac{\partial u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j} = \sum_{i=0}^N 2\omega_i (x_j - c_{ij}) e^{-\gamma_i r_i^2} (f_i \cos(f_i r_i^2 - \varphi_i) - \gamma_i \sin(f_i r_i^2 - \varphi_i)) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j^2} = & \sum_{i=0}^N 2\omega_i e^{-\gamma_i r_i^2} \\ & [- (2(f_i^2 - \gamma_i^2)(x_j - c_{ij})^2 + \gamma_i) \sin(f_i r_i^2 - \varphi_i) - (4f_i \gamma_i (x_j - c_{ij})^2 - f_i) \cos(f_i r_i^2 - \varphi_i)] \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_{apx}(\mathbf{x})}{\partial x_j \partial x_k} = & \sum_{i=0}^N -4\omega_i (c_{ij} - x_j)(c_{ik} - x_k) e^{-\gamma_i r_i^2} \\ & [(f_i^2 - \gamma_i^2) \sin(f_i r_i^2 - \varphi_i) + 2f_i \gamma_i \cos(f_i r_i^2 - \varphi_i)] \end{aligned} \quad (3.21)$$



# Picture Library – revised

