Annonce d'un stage M2
« Deep Ritz, Problèmes aux Limites et Apprentissage Semi-Supervisé »

1 Informations générales

- **Dates prévues pour le stage :** Avril-Aout ou Mai-Septembre 2024 (**5 mois)**
- **Encadrente :** A. Rozanova-Pierrat,
CentraleSupélec, Université Paris-Saclay, Bâtiment Bouygues, 3 rue Joliot-Curie, 91190 Gif-sur-Yvette ; anna.rozanova-pierrat@centralesupelec.fr
Tél. : 01 75 31 67 19
- **Laboratoire :** MICS (Laboratoire de Mathématiques et Informatique pour la Complexité et les Systèmes)
- **Financement** : bourse de DATAIA
- **Mots clés :** EDPs, fractals, réseaux neuronaux, IA, optimisation Deep Ritz
- **But final :** *une thèse en cotutelle avec l'Université de Connecticut (UCONN, les États Unies).* La thèse servira de continuer et approfondir le sujet du stage et de le développer beaucoup plus profondément sur des différents modèles dont il est possible d'abord d'obtenir les questions d'existences/le caractère bien-posé et ensuite voir les approximations des solutions, ainsi que la vitesse de la convergence de ces approximations.

2 Description :

Le stage est proposé en collaboration et co-direction avec Professeur A. Teplyaev de l'Université de Connecticut, les États Unies, qui est un spécialiste en méthodes non lisses en intelligence artificielle, en information quantique et en apprentissage automatique semi-supervisé, qui est un nouveau domaine scientifique important se trouvant au centre des objectifs de DATAIA. L'aboutissement de ce stage permettra au stagiaire d'effectuer une thèse en cotutelle entre l'Université Paris-Saclay et l'Université de Connecticut en co-direction entre A. Rozanova-Pierrat et A. Teplyaev.

La phase initiale de ce stage est motivée par les résultats significatifs obtenus dans le domaine de la résolution des problèmes aux limites en haute dimension à l'aide de réseaux neuronaux, comme le montrent les recherches citées dans les références [9] et [6].

D'un point de vue théorique, les auteurs de [6] et [10] ont démontré la convergence de la méthode d'optimisation Deep Ritz pour des ensembles très généraux. Cette méthode est fondée sur le principe de l'approximation des fonctions continues ou intégrables par l'utilisation de réseaux neuronaux, avec l'objectif spécifique d'aborder la formulation faible des équations aux dérivées partielles. Notamment, ces équations sont définies sur des ensembles avec des hypothèses de régularité minimales, ce qui rend la méthode Deep Ritz adaptable même en présence d'ensembles irréguliers.

Il s’agit là d’un exemple typique de synergie entre les méthodologies classiques et les réseaux neuronaux, qui permet d’obtenir des résultats plus satisfaisants que ce que chaque approche peut réaliser individuellement. Il est important de noter que cette observation dépasse le domaine de la résolution d’équations différentielles et les applications dans le traitement des images, du son et du texte, y compris le domaine du traitement du langage naturel (NLP).

Par conséquent, notre objectif global est d’établir des liens significatifs entre la méthode Deep Ritz, telle qu’élucidée dans [10], la descente de gradient stochastique et le problème d’apprentissage semi-supervisé qui se pose naturellement, tel que documenté dans [4]. Bien que des travaux préliminaires, comme le montre [5], aient établi des liens entre l’apprentissage supervisé, les problèmes de valeurs limites et la minimisation de l’énergie, il existe d’importantes possibilités d’améliorer une variété d’algorithmes d’apprentissage supervisé.

En outre, comme indiqué dans [9], il est proposé que les espaces de Sobolev et de Besov ne soient pas optimaux, ce qui conduit à l’introduction de nouveaux espaces d’analyse fonctionnelle visant à examiner l’efficacité des réseaux neuronaux dans le traitement des équations différentielles partielles, en particulier celles qui comportent des contraintes de bord, communément appelées "problèmes de valeurs limites". Il est essentiel de noter que beaucoup de ces méthodes sont de nature heuristique et manquent d’un fondement théorique solide.

La deuxième facette de ce stage comprend une exploration des méthodes d’éléments finis conçues pour traiter des problèmes de valeurs limites spécifiques concernant les frontières fractales, un domaine de recherche relativement naissant avec des résultats prometteurs,[2].

Notre objectif est de concevoir des méthodes numériques d’intégration adaptées pour ces ensembles fractals, en exploitant potentiellement les réseaux neuronaux, en se basant sur [1] et [11].

L’intérêt générale pour les fractales vient du fait qu’ils constituent un moyen relativement simple de modéliser la complexité de la nature et de ses processus [7]. En particulier, les fractales trouvent de plus en plus d'applications dans les domaines de l'ingénierie (pour les échanges de chaleur [3], la conception de chambres anéchoïques pour l'absorption des ondes, l'architecture fractale, les modèles pulmonaires, etc.) Les résultats des recherches récentes de A. Rozanova-Pierrrat dans le domaine des problèmes d'optimisation des formes ont montré qu'il existe des situations où il n'est pas possible de trouver une forme optimale régulière et que, pour être optimale, la forme doit nécessairement être fractale. D'un point de vue physique, on sait que les formes fractales sont optimales car elles sont les plus stables, les plus dissipatives, les plus conductrices, etc. C'est le cas de la dissipation optimale d'une source de propagation d'ondes émettant une infinité de fréquences. Ainsi ce projet servira au développement des différentes applications de la théorie mathématique des fractales pour des applications d'ingénierie concrètes.

Nous cherchons ainsi à établir un pont entre les problèmes de valeurs limites fractales et le domaine de l’apprentissage semi-supervisé, opérationnalisant ainsi la recherche menée dans la première partie du stage.

En outre, une question importante se pose quant à la compréhensibilité des algorithmes de réseaux neuronaux, un sujet qui a été étudié en profondeur dans [8]. Nous souhaitons apporter une contribution significative dans ce domaine en ce qui concerne les données fractales. Avec l’établissement d’une base théorique solide, nous aspirons à mieux comprendre la capacité de généralisation d’un réseau neuronal, en particulier sa capacité à fonctionner dans des scénarios qui n’ont jamais été rencontrés auparavant.

En conclusion, notre exploration de ces domaines dynamiques souligne leur pertinence dans le monde réel. Cette bourse offre la possibilité de façonner et d’innover dans les domaines de l’apprentissage automatique, de l’IA et du big data.

References

[1] M. Dissanayake, N. Phan-Thien, *Neural-network-based approximations for solving partial differential equations*, Commun. Numer. Methods Eng. 10 (3), 195–201, 1994.

[2] A. M. Caetano, S. N. Chandler-Wilde, A. Gibbs, D. P. Hewett, A. Moiola, *A Hausdorff-measure boundary element method for acoustic scattering by fractal screens*. Preprint arXiv:2212.06594, 2022.

[3] A. Rozanova-Pierrat, D. S. Grebenkov, B. Sapoval. *Faster Diffusion across an Irregular Boundary*, Physical Review Letters, 108, pp. 240602, 2012,

[4] M. Belkin, P. Niyogi, *Towards a theoretical foundation for Laplacian-based manifold methods*, Journal of Computer and System Sciences, 74 (8), 1289-1308, 2008.

[5]L. Rosasco, M.Belkin, E. De Vito, *On Learning with Integral Operators*, Journal of Machine Learning Research, 11(30), 905–934, 2010.

[6] E. Weinan, Y.Bing, *The deep Ritz method: a deep learning-based numerical algorithm for solving variational problems*, Commun. Math. Stat. 6(1), 1–12, 2018.

[7] S.V. Buldyrev. *Fractals in Biology*. In: Meyers, R. (eds) Encyclopedia of Complexity and Systems Science. Springer, New York, NY. 2009.

[8] Md. R. Karim, Md. Shajalal, A. Graß, T. Döhmen, S. A. Chala, C. Beecks, S. Decker. *Interpreting Black-box Machine Learning Models for High Dimensional Datasets*. Preprint arXiv:2208.13405, 2022.

[9] E. Weinan , M. Chao , W. Lei, *The Barron Space and the Flow-induced Function Spaces for Neural Network Models*, Constructive Approximation 55, 369–406, 2022.

[10] P. Dondl, J. Müller, M. Zeinhofer, *Uniform Convergence Guarantees for the Deep Ritz Method for Nonlinear Problems*, Advances in Continuous and Descrete Models, 49, 2022.

[11] J. Sirignano and K. Spiliopoulos, DGM: *A deep learning algorithm for solving partial differential equations*, *Journal of Computational Physics*, 375, 1339-1364, 2018.