Projet SPARSEROM (CMLA-LMT)

Représentations sparse pour la réduction de modèles de problèmes aux dérivées partielles.

Résumé

Dans ce projet conjoint LMT et CMLA, on s'intéresse à des techniques de réduction de modèles de solutions de problèmes d'optimisation aux dérivées partielles paramétrés. La piste envisagée est l'utilisation de représentations parcimonieuses faisant appel à une régularisation (ou la prise en comptes de contraintes) en norme ℓ^1. Les bons candidats de la base réduite sont recherchés dans une base de données (dictionnaire). L'avantage de l'approche est la recherche adaptative d'une base réduite en fonction du paramètre courant. Nous souhaitons appliquer et valider la méthodologie dans un cadre d'Ingénierie réelle.

Mots clés. Représentation parcimonieuse (sparse), régression, pénalisation en norme ℓ^1, équation aux dérivées partielles, problèmes paramétrés, conception robuste, réduction de modèle, réduction de dimensionalité, POD, PGD, synthèse, estimation d'erreur, visualisation, temps réel.

Co-responsables. Florian De Vuyst (CMLA) et David Néron (LMT)

Équipe. Co-responsables

Durée. 2 ans.

1 Motivation

La simulation numérique prend aujourd'hui une place essentielle dans de nombreuses branches de l'ingénierie. Les évolutions incroyables des moyens de calculs et d'affichage peinent cependant à compenser la complexité croissante des modèles que les ingénieurs souhaiteraient pouvoir manipuler dans leur démarche quotidienne de dimensionnement. Un exemple typique est la prise en compte de la variabilité et l'optimisation d'une conception qui est une thématique majeure pour les industriels. Elle nécessite la résolution d'un problème paramétré pour un très grand nombre de valeurs des paramètres, ce qui peut conduire à des études totalement irréalisables ou alors dans des durées incompatibles avec les échelles de temps imposées par la conception d'un produit. Pour ce type de problèmes, qui constitue aujourd'hui un verrou scientifique, les techniques de réduction de modèles connaissent un véritable engouement dans les communautés de mathématiques appliquées et de la mécanique car elles offrent un énorme potentiel pour développer des outils novateurs pour le calcul hautes performances.

De manière très succincte, l'idée de base de la réduction de modèles est que la réponse d'un problème paramétré d'une complexité apparente très importante peut souvent être représentée avec une précision suffisante dans une base de dimension réduite, à condition de choisir judicieusement les vecteurs qui la composent. Différentes voies ont été explorées pour construire cette base réduite. Les approches les plus répandues consistent à la construire dans une étape préliminaire, qui peut être réalisée hors ligne (offline). Pour cela, on peut résoudre le problème paramétré pour quelques valeurs bien choisies des paramètres, ou résoudre un problème de substition, plus simple que le problème initial mais qu'on suppose suffisamment représentatif de celui-ci, et décomposer la solution en utilisant la POD (Proper Orthogonal Decomposition). La base réduite qui en résulte est alors utilisée en ligne (online) pour bâtir et résoudre un modèle réduit du problème de départ [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Une philosophie différente, appelée PGD (Proper Generalized Decomposition), consiste à générer la base réduite à la volée, entièrement en ligne, en utilisant des algorithmes qui permettent de rechercher la solution d'un problème en même temps que la « meilleure » base réduite pour représenter celle-ci [7, 8, 9]. Le choix entre les différentes approches est souvent une question de compromis entre plusieurs critères. En particulier, les techniques offline/online seront provilégiées si la rapidité d'exécution de la phase online, qui va devoir être réalisée un grand nombre de fois, permet d'amortir le coût de la phase offline de construction de la base réduite ; à l'inverse, les méthodes à la volée auront une efficacité particulière lorsqu'on cherchera à minimiser la durée globale de l'étude... Des techniques hybrides sont évidemment envisageables [10].

En ce qui concerne les méthodes à la volée pour le traitement des problèmes paramétrés, [11] propose une approche basée sur la PGD qui consiste à considérer l'ensemble des paramètres comme des coordonnées (au même titre que les variables temporelle ou spatiale) et à rechercher hors ligne la solution du problème pour l'ensemble des valeurs des jeux de paramètres. Cette approche séduisante nécessite cependant la mise en place d'une algorithmie dédiée et ne permet pas une exploitation non intrusive des codes de calculs commerciaux ou une réutilisation de résultats de simulations ou d'expérimentations qui auraient pu être réalisées auparavant. Une technique différente [12] permet de réutiliser (au moins partiellement) les codes de calculs déjà disponibles en explorant l'espace des paramètres et en construisant progessivement une base réduite commune à l'ensemble des solutions. Lorsque la solution du problème est requise pour un nouveau jeu de paramètres, la base réduite préalablement générée pour les jeux de paramètres précédents est d'abord réutilisée puis enrichie si nécessaire. Ceci permet une réduction très importante du coût de calcul total par rapport à l'utilisation d'une approche directe. La figure 1 montre un exemple de résultats issu d'une étude réalisée pour SAFRAN afin de vérifier la fiabilité en fatigue d'une ailette du moteur Vulcain qui équipe le lanceur Ariane 5. Cette étude a nécessité le calcul de la contrainte maximale dans la pièce pour 1 000 jeux de paramètres correspondant aux variations de l'amplitude du chargement et de deux des constantes définissant le comportement du matériau élasto-viscoplastique. Dans cette exemple, la réutilisation de la base réduite a permis de faire passer le temps de calcul de plusieurs mois avec une code industriel standard à quelques jours.

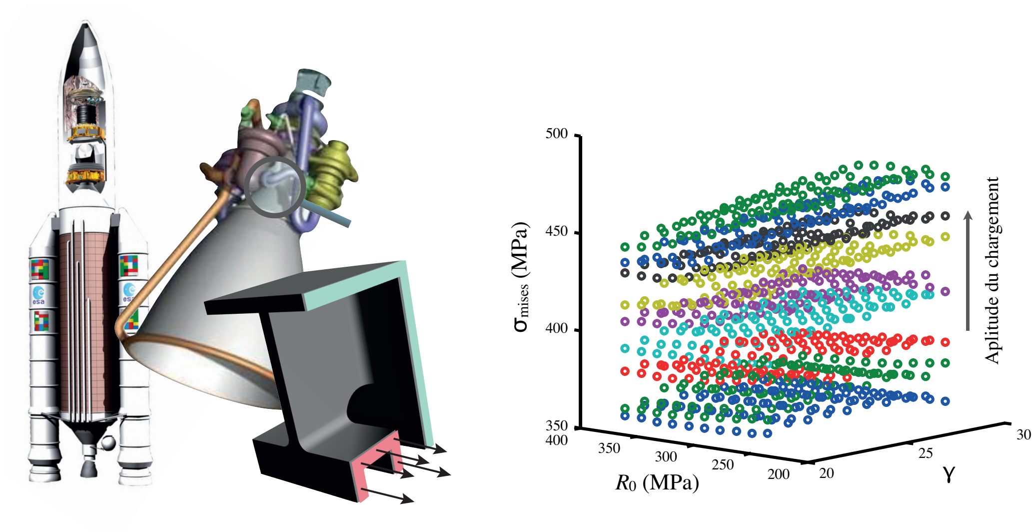

FIGURE 1 – Ailette du moteur Vulcain, étude paramétrique portant sur 1 000 jeux de paramètres

Une voie d'amélioration particulièrement intéressante pour l'ensemble de ces techniques basées sur la réutilisation d'une base réduite est clairement la diminution du coût de manipulation du modèle réduit. Si on imagine que la base réduite qui a été construite est de grande dimension, ce qui peut être le cas pour un problème à grand nombre de paramètres, la recherche de la solution comme une combinaison linéaire de l'ensemble des vecteurs peut engendrer un temps de calcul important. L'ambition de ce projet est donc de proposer une approche de sélection parcimonieuse des vecteurs à utiliser pour chercher une nouvelle solution du problème afin de réduire ce coût.

Une telle approche pourrait permettre d'envisager une technique de réduction de modèles basée sur l'utilisation des « dictionnaires », très riches donc de grandes dimensions, composés à la fois de résultats issus de calculs numériques, de solutions analytiques, mais aussi d'expérimentations, dont les seuls les éléments pertinents associés au problème qu'on cherche à traiter seraient activés pour assurer une résolution à la fois précise et peu coûteuse.

2 Détails scientifiques

Soit Ω un domaine borné à frontière Lipschitzienne de $\mathbb{R}^d$, $d \in \{1, 2, 3\}$ et F un sous-ensemble compact de $\mathcal{X} = \mathcal{C}^0(\Omega)$. La n-épaisseur de Kolmogorov $d_n(F, \mathcal{X})$ de F dans $\mathcal{X}$ mesure la meilleure distance possible de F à un sous-espace vectoriel de dimension n de $\mathcal{X}$:

$$d_n(F, \mathcal{X}) = \inf_{\substack{X_n \subset \mathcal{X}, \\ dim(X_n)=n}} \sup_{x \in F} \inf_{y \in X_n} \|x - y\|_{\mathcal{X}}. \tag{1}$$

Par des arguments classiques de densité, on sait qu'il existe des espaces vectoriels de dimension finie (par exemple des espaces de polynômes) tel que pour tout F, tout élément f de F peut être approché par une combinaison linéaire d'éléments de X_n de manière raisonnable, conduisant à une n-épaisseur de Kolmogorov assez petite pour n assez grand. Maintenant, il existe de nombreux problèmes applicatifs pour lesquels des ensembles d'intérêt F possèdent une n-épaisseur petite à n assez petit. Cette observation est à la base des méthodologie de bases réduites (reduced-order basis ou RBM) et plus généralement de réduction de modèle (reduced-order modeling ou ROM). Nous souhaitons exploiter cette propriété pour approcher et représenter de manière réduite des solutions de problèmes d'optimisation en dimension infinie et aux dérivées partielles.

2.1 Problème de minimisation

De manière abstraite, considérons V un espace fonctionnel de fonctions définies sur le domaine spatial Ω, $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^d$ un ensemble convexe fermé de vecteurs de paramètres admissibles, μ un élément de $\mathcal{P}$ et J une fonctionnelle assez régulière définie dans $V \times \mathcal{P}$. Pour $\mu \in \mathcal{P}$, on cherche u_μ la solution du problème de minimisation

$$\min_{v \in V} \quad J(v; \mu). \tag{2}$$

Plus précisément, on souhaite même déterminer toute la famille de solutions $\{u_\mu\}_{\mu \in \mathcal{P}}$. Ce problème est évidemment "difficile" au sens de la complexité algorithmique, en particulier quand d est grand.

Pour l'approximation numérique, on formule le problème dans un espace fonctionnel discret de dimension finie que l'on note V^h. On souhaiterait déterminer/approcher efficacement la famille de solutions $\{u^h_\mu\}_{\mu \in \mathcal{P}}$, avec

$$u^h_\mu = \arg \min_{v^h \in V^h} \quad J(v^h; \mu)$$

à μ donné.

2.2 Dictionnaires, représentation creuse

Au lieu d'utiliser une technique de discrétisation standard (éléments finis, etc.), nous explorons la piste de la réduction de modèle qui utiliser un ensemble de solutions précalculées $\{u^h_i\}_{i \in I}$ (par exemple à partir d'un échantillonnage $\{\mu_i\}_{i \in I}$ de l'ensemble $\mathcal{P}$). La constitution de la base de données $\{u^h_i\}_{i \in I}$ (dictionnaire) est effectuée offline. Le dictionnaire peut être constitué à la fois de solutions numériques, de solutions analytiques et de solutions expérimentales.

Une technique de réduction de modèle classique est d'appliquer une analyse en composantes principales (ACP) φ_i sur l'ensemble $\{u_i^h\}_{i\in I}$ et d'utiliser les K premiers modes. Dans ce cas, pour $\mu \in \mathcal{P}$ quelconque on cherche une solution approchée u_μ^h de la forme

$$u_\mu^h = \bar{u}^h + \sum_{k=1}^{K} a_k(\mu)\, \varphi^k$$

ou sous forme matricielle

$$U_\mu^h = \bar{U}^h + \Phi \boldsymbol{a}.$$

On reconnaît la réduction POD (Proper Orthogonal Decomposition) classique avec les coefficients de décomposition POD $a_k(\mu)$. Un des défauts de cette approche est que pour avoir une bonne approximation sur tout l'ensemble paramétrique, il faut parfois un rang de troncature $K = K(\mathcal{P})$ assez grand, ce qui fait perdre en performance de calcul et en gain de représentation.

L'ACP fait partie des méthodes linéaires de réduction de dimensionalité. Dans le présent projet, nous souhaitons explorer des techniques de réduction non linéaires adaptatives, à savoir les méthodes parcimonieuses par pénalisation en norme ℓ^1.
Étant donné un coefficient de pénalisation $c > 0$, on cherche à résoudre

$$u_\mu^h = \arg \min_{a:\ v^h = \sum_{i=1}^{I} a_i u_i^h} \quad J(v^h;\mu) + c|a|_1.$$

Une variante par contrainte inégalité en norme 1 serait de rechercher

$$u_\mu^h = \arg \min_{a:\ v^h = \sum_{i=1}^{I} a_i u_i^h} \quad J(v^h;\mu)$$

sujet à

$$|a|_1 \leqslant C$$

pour une borne $C > 0$ donnée. Dans les deux cas de figure, la pénalisation ou la contrainte en norme 1 va "activer" seulement quelques représentant u_i^h dans de dictionnaire, permettant ainsi d'avoir une représentation creuse réduite (voir Elad [13]). Il existe différentes techniques numériques de résolution de ces problèmes d'optimisation non différentiables (voir notamment [13] ou [14, 15, 16]).

Un des avantages que nous pressentons à cette approche parcimonieuse adaptative est qu'elle adapte en quelque sorte la base réduite au point paramétrique courant μ. Nous devrions ainsi gagner en performance de réduction et, par conséquent en performance de reconstruction et de restitution.

2.3 Extensions, variantes

Il existe de nombreuses formulations et variantes à expérimenter et analyser dans ce projet. Par exemple, nous pourrions utiliser un deuxième niveau de plan d'expérience numérique qui calcule pour un échantillonnage donné les représentations sparse aux points d'échantillonnage. S'il y a une certaine régularité en μ dans les éléments activités du dictionnaire, nous pouvons tirer avantage de cette régularité pour constuire un partitionnement dans le domaine paramétrique et permettre d'initialiser correctement l'algorithme d'optimisation pour une nouvelle recherche parcimonieuse.

2.4 Visualisation et exploration paramétrique

Nous comptons utiliser le mur d'image DIGISCOPE comme dispositif expérimental de visualisation pour ce projet. Nous avons plusieurs "vues" d'intérêt dans la restitutions des résultats de réduction parcimonieuse : l'affichage des solutions dans l'espace physique proprement dit, l'affichage des solutions approchées, l'affichage

des coefficients non nuls dans la représentation parcimonieuse et les représentants associés, le partionnement dans l'espace paramétrique, la régularité des coefficients activés, etc ... Nous pouvons aussi ajouter une dimension "qualité de l'approximation" en fonctions des coefficients de pénalisation ou de contrainte de borne en norme 1.
Nous évaluerons l'intérêt de l'utilisation d'une grande surface de visualisation telle que DIGISCOPE dans le processus de recherche de solutions d'intérêt en ingénierie de conception.

3 Ambition scientifique

Le présent projet est à caractère exploratoire. L'Institut Farman est le cadre idéal pour amorcer une collaboration Math-Méca sur le sujet et expérimenter l'utilisation des représentations parcimonieuses dans la réduction de modèles de solutions de problèmes aux dérivées partielles. En fonction des résultats, nous pourrons le cas échéant envisager le montage d'un projet scientifique de plus grande ampleur (par exemple ANR) avec par exemple le démarrage d'une thèse de Doctorat sur le sujet.

4 Demande financière (sur deux ans)

Pour le présent projet, nous demandons une aide de fonctionnement qui nous permettra de financer des stages de Master sur le sujet ainsi que les frais d'inscription à des conférences spécialisées sur le thème. Nous demandons aussi un petite d'aide d'équipement pour l'aide au renouvellement des équipements informatiques de chacun des deux laboratoires impliqués et l'achat de tablettes `Android` pour explorer certaines pistes de visualisation/interaction avec ces dispositifs.

Équipement	2000 €
Fonctionnement	12000 €
TOTAL	14000 €

TABLE 1 – Récapitulatif de la demande financière

Références

[1] Y. Maday, A.T. Patera, G. Turinici, A priori convergence theory for reduced-basis approximation of single-parameter elliptic partial differential equations, J. of Sci. Computing, 17 (1-4), 437–446 (2002).

[2] Y. Maday, N. Nguyen, A. Patera ad G. Pau, A general multipurpose interpolation procedure : the magic points, Commun. Pure Appl. Anal., 383–404 (2009).

[3] P. Binev, A. Cohan, W. Dahmen, R.A. DeVore, P. Petrova and P. Wojtaszczyk, Convergence rates for greedy algorithms in reduced basis methods, 2011.

[4] A. Buffa, Y. Maday, A. Patera, C. Prud'homme, G. Turinici, A priori convergence of the greedy algorithm for the parametrized reduced basis method, ESAIM : Mathematical modelling and Numerical Analysis, 46 (3), 595–603 (2012).

[5] C. Audouze, F. De Vuyst, P. Nair, Nonintrusive reduced-order modeling of parameterized time-dependent partial differential equations, Num. methods for Partial Diff. Equations, vol. 29 (5), pp 1587–1628, 2013.

[6] Y. Maday, O. Mula, A generalized empirical interpolation method (GEIM) : application of reduced basis techniques to data assimilation, Analysis and Numerica of Partial Differential Equations, vol. XIII, pp. 221–236, 2013.

[7] P. Ladevèze. Nonlinear Computationnal Structural Mechanics—New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation. Springer Verlag, 1999.

[8] P. Ladevèze, J.-C. Passieux, and D. Néron. The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 199 :1287–1296, 2010.

[9] F. Chinesta, P. Ladevèze, and E. Cueto. A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition. Archives of Computational Methods in Engineering, 18(4) :395–404, 2011.

[10] C. Heyberger, P.-A. Boucard, and D. Néron. A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the PGD framework. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 259 :40–49, 2013.

[11] B. Bognet, F. Bordeu, F. Chinesta, A. Leygue, and A. Poitou. Advanced simulation of models defined in plate geometries : 3D solutions with 2D computational complexity. Computational Methods in Applied Mechanical Engineering, 201 :1–12, 2012.

[12] N. Relun, D. Néron, and P.-A. Boucard. A model reduction technique based on the PGD for elastic-viscoplastic computational analysis. Computational Mechanics, 51(1) :83–92, 2013.

[13] Michael Elad, Sparse and redundant representations. From theory to applications in Signal and Image Processing, Springer, New York, 2010.
[14] R. Tibshirani, Regression shrinkage and selection via the LASSO. J. Royal. Statist. Soc B., Vol. 58, No. 1, pages 267-288, 1996.
[15] W. J. Fu., Penalized Regressions : The Bridge Versus the LASSO, Journal of Computational and Graphical Statistics, 7 :397-416, 1998.
[16] G. V. Pendse, "A tutorial on the LASSO and the "shooting algorithm", available on internet.