UNIVERSITE DE STRASBOURG

ECOLE DOCTORALE MATHEMATIQUES SCIENCES DE L'INFORMATION ET DE L'INGENIEUR

RESUME DE LA THESE DE DOCTORAT

Discipline : Mathématiques

Spécialité (facultative) : /

Présentée par : Frédérique Lecourtier

Titre : Méthodes hybrides éléments finis et réseaux de neurones pour les EDP paramétriques

Unité de Recherche : Laboratoire des sciences de l'Ingénieur, de l'Informatique et de l'Imagerie, Icube, UMR 7357

Directeur de Thèse : Emmanuel Franck - Directeur de recherche

Co-Directeur de Thèse (s'il y a lieu) : /

Localisation : Strasbourg, France

Thèse confidentielle : ■ NON ☐ OUI

Contexte et motivations

Les équations aux dérivées partielles (EDP) servent à modéliser un grand nombre de problèmes rencontrés dans les domaines des sciences et de l'ingénierie. Dans la grande majorité des cas, ces équations n'admettent pas de solution analytique, et il faut recourir à des méthodes numériques pour construire une approximation. Résoudre ces problèmes à la fois avec précision et efficacité en termes de temps de calcul constitue un défi majeur. Plusieurs grandes familles de méthodes numériques, dites « méthodes haute fidélité », ont été développées pour discrétiser ces EDP. On y retrouve notamment les méthodes de différences finies, les méthodes des éléments finis, les méthodes des volumes finis, ainsi que les méthodes spectrales. Ces méthodes classiques de haute fidélité présentent néanmoins des limites qui ont motivé des développements plus récents. En particulier, deux difficultés majeures se posent dans le cadre de la thèse. D'une part, lorsque le problème dépend d'un ou de plusieurs paramètres physiques et doit être résolu un grand nombre de fois pour différentes valeurs de ces paramètres, répéter une résolution complète à l'aide de l'une de ces méthodes haute fidélité devient rapidement prohibitif. D'autre part, l'expressivité limitée des espaces d'approximation polynomiaux nécessite un maillage très fin pour capter les structures fines de la solution. Ces dernières années ont ainsi vu l'émergence du machine learning scientifique, qui propose de remplacer ces espaces d'approximation classiques par des réseaux neuronaux. En effet, les réseaux neuronaux sont capables de représenter des fonctions complexes sans nécessiter de discrétisation par un maillage. De plus, dans le contexte paramétrique mentionné, les approches deviennent particulièrement intéressantes. Cependant, les méthodes neuronales présentent elles aussi des limites bien identifiées, telles que l'absence de garanties théoriques et d'estimateurs d'erreur fiables, des difficultés d'apprentissage et une forte sensibilité aux hyperparamètres. Plutôt que d'opposer ces deux familles de méthodes, cette thèse explore la voie de leur hybridation.

Problématique et organisation de la thèse

Dans cette thèse, nous nous plaçons dans le contexte de la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP) paramétriques, en particulier des EDP elliptiques. L'objectif est de développer des méthodes hybrides, capables de résoudre efficacement ce problème pour un grand nombre de valeurs de ces paramètres, en combinant les avantages des méthodes classiques de haute fidélité et ceux des approches basées sur les réseaux neuronaux. L'idée principale étudiée au cours de cette thèse est l'enrichissement des espaces d'approximation classiques avec des informations provenant de modèles neuronaux, afin d'améliorer la précision et l'efficacité des résolutions numériques. Cette thèse développe cette hybridation autour de deux contributions principales.

La première contribution consiste à enrichir les espaces d'approximations éléments finis classiques à l'aide d'un a priori neuronal fixé. Plus précisément, un réseau de neurones est entraîné hors ligne pour toute une famille de paramètres et vient injecter en ligne de l'information dans la résolution éléments finis. Ce travail fait l'objet d'une publication dans la revue ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis (M2AN).

La seconde contribution part d'un principe différent en cherchant à rendre le solveur numérique lui-même différentiable. Cette seconde direction s'appuie sur le développement

d'une bibliothèque de calcul différentiable nommée `ScimBa`, et le travail reste, à ce jour, en cours.

Enrichir les éléments finis par un a priori neuronal

La première contribution de cette thèse consiste à enrichir les espaces d'approximation éléments finis classiques à l'aide d'un a priori neuronal. Le principe repose sur un réseau de neurones informé par la physique (PINN), entraîné une seule fois (hors ligne) pour toute une famille de valeurs des paramètres du problème. La prédiction produite par celui-ci constitue un a priori sur la solution, qui est ensuite injecté dans l'espace d'approximation éléments finis, où pour chaque nouvelle valeur des paramètres une résolution éléments finis classique, mais enrichie par ce prior, est effectuée (en ligne). Deux façons d'injecter ce prior ont été développées et comparées : une approche additive, où la solution éléments finis s'écrit comme la somme de l'a priori et d'une correction éléments finis, et une approche multiplicative, où elle s'écrit comme leur produit.

Le résultat théorique principal établit que, dans les deux cas, les ordres de convergence classiques des éléments finis sont préservés, et que le gain apporté par l'enrichissement dépend uniquement de la qualité du réseau neuronal, et en particulier de la précision de ses dérivées, dont l'ordre dépend du degré polynomial des éléments finis utilisés. Dans le cas de l'approche multiplicative, un rehaussement du problème est nécessaire pour garantir que l'a priori neuronal ne s'annule pas. Il est également montré que le gain apporté par l'approche multiplicative converge vers celui de l'approche additive lorsque son paramètre de rehaussement tend vers l'infini, établissant une équivalence entre les deux stratégies.

Ces résultats sont validés numériquement sur une gamme de cas tests de complexité croissante en dimension un, deux et trois : problème de Poisson, système elliptique en régime de convection dominante, ou encore problème anisotrope. Dans le manuscrit, une extension purement heuristique aux équations de Navier–Stokes en dimension deux est également proposée. Ces expériences montrent qu'à précision égale, la méthode permet d'utiliser des maillages 5 à 28 fois plus grossiers que ceux requis par la méthode éléments finis standard, selon les cas tests considérés. En dimension trois, une étude plus approfondie des temps de calcul est menée, et il est montré que, dans le cadre paramétrique, un gain de temps global, incluant l'entraînement du réseau neuronal, est obtenu dès que 19 jeux de paramètres doivent être résolus pour atteindre une précision relative en norme L^2 de 10^{-3} sur un problème de Poisson.

Bibliothèque ScimBa et schémas de Galerkin apprenables

La seconde contribution part d'un principe différent, en choisissant de rendre le solveur numérique lui-même différentiable et donc apprenable, plutôt qu'en enrichissant a posteriori une solution éléments finis par un prior fixé. Cette direction s'appuie sur le développement de la bibliothèque `ScimBa` implémentée en `JAX` et portée par l'équipe-projet Inria MACARON. Cette contribution se divise en deux axes principaux.

Le premier axe consiste en l'implémentation des modules nécessaires à la construction d'un schéma de Galerkin différentiable dans `ScimBa`. En particulier, les méthodes implémentées dans la librairie sont les méthodes de Galerkin discontinues (DG), les éléments finis continus (FEM) et une variante de FEM, nommée φ-FEM, qui repose sur une fonction level-set pour représenter la géométrie. Le caractère différentiable de cette implémentation, rendu possible via `JAX`, permet de rendre les schémas de Galerkin implémentés dans `ScimBa` apprenables. De manière équivalente à la première contribution, on peut ainsi enrichir les bases classiques associées à l'espace d'approximation par un prior neuronal, mais cette fois-ci le prior n'est plus fixé hors ligne mais appris en ligne à travers le solveur. Enrichir les bases via un prior neuronal revient à résoudre un problème d'optimisation bi-niveau qui, à chaque étape de l'apprentissage, doit résoudre le schéma numérique pour obtenir la solution associée à la valeur courante des paramètres du réseau, avant de pouvoir mettre à jour ceux-ci pour réduire la fonction de coût considérée. Calculer le gradient de cette fonction de coût par rapport aux paramètres apprenables nécessite alors de différentier la résolution numérique elle-même. La différentiation implicite couplée à la méthode adjointe permet d'obtenir efficacement ce gradient avec un unique système linéaire supplémentaire, associé au problème adjoint, quel que soit le nombre de paramètres.

Le second axe explore, en considérant deux options, l'enrichissement neuronal des bases via le solveur de Galerkin différentiable implémenté dans `ScimBa`. La première option se place dans le cadre d'une résolution non-paramétrique de l'EDP, c'est-à-dire en considérant des paramètres physiques fixés, et vise à enrichir la base éléments finis ou DG pour ce paramètre précis, à l'aide d'un réseau entraîné comme un PINN, c'est-à-dire en minimisant le résidu physique de l'EDP. La seconde option, faisant l'objet de plusieurs variantes, se place dans le cadre d'une résolution paramétrique de l'EDP, et vise au contraire à apprendre une base unique, valable pour toute une famille de paramètres. Dans ce cas, un seul réseau est alors entraîné, non plus en minimisant un résidu physique, mais en ajustant ses paramètres apprenables en utilisant des solutions de référence, à la manière d'un opérateur neuronal (NO). La base considérée peut alors être commune à tous les paramètres, ou conditionnée par les paramètres eux-mêmes, ou encore conditionnée par le champ physique du problème.

Ces deux options (paramétrique et non-paramétrique), permettant de rendre les bases de schémas de Galerkin apprenables, sont testées sur des cas tests préliminaires et montrent des résultats prometteurs. En particulier, pour un problème d'advection-diffusion 1D, on observe une amélioration significative de la précision de la solution obtenue avec des bases enrichies qui s'adaptent à la solution, notamment à la structure de la couche limite. Ces résultats sont toutefois encore exploratoires et nécessitent d'être approfondis.

Conclusion et perspectives

Cette thèse a exploré deux stratégies complémentaires pour hybrider les méthodes éléments finis classiques avec les réseaux de neurones, dans le contexte de la résolution d'équations aux dérivées partielles paramétriques. La première consiste à enrichir a posteriori un solveur éléments finis classique à l'aide d'un a priori neuronal fixé, entraîné hors ligne pour toute une famille de paramètres. La seconde consiste à rendre le solveur numérique lui-même différentiable et apprenable, en utilisant la bibliothèque `ScimBa`. Chacune de ces deux approches hybrides apporte un gain sur le coût de résolution dans le

contexte paramétrique qui motive cette thèse, démontré pour la première et encore préliminaire mais prometteur pour la seconde. Plusieurs perspectives se dégagent de ce travail, comme la généralisation à des problèmes instationnaires, la considération de géométries complexes, ou encore l'étude de problèmes non-linéaires. Plus généralement, les travaux menés autour des schémas de Galerkin apprenables doivent être approfondis.

Liste des travaux et communications

Publications

Au cours de ces trois années, une publication a été rédigée et publiée, décrivant le pipeline de résolution ainsi que les résultats théoriques et numériques obtenus pour la première contribution.

— Hélène BARUCQ, Michel DUPREZ, Florian FAUCHER, Emmanuel FRANCK, Frédérique LECOURTIER, Vanessa LLERAS, Victor MICHEL-DANSAC, Nicolas VICTORION. *Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks.* ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis (M2AN), vol. 60, n°2, p. 541–603, 2026.

Nous espérons que les travaux en cours, commencés cette année, feront l'objet d'une seconde publication, en collaboration avec l'équipe Macaron, qui développe activement la bibliothèque `ScimBa`.

Diffusion scientifique

Présentations orales :

— Séminaire EDP, IRMA, Strasbourg – 24 novembre 2026 : *« Méthodes éléments finis et réseaux de neurones pour des EDPs paramétriques »*
— Séminaire MACS, IMAG, Montpellier – 10 novembre 2026 : *« Méthodes éléments finis et réseaux de neurones pour des EDPs paramétriques »*
— SciCADE 2026, Édimbourg – 3 juillet 2026 : *« Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks »*
— CANUM 2026, Saint-Jacut-de-la-Mer – 4 juin 2026 : *« Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks »*
— PhD student seminar, Montpellier – 17 décembre 2025 : *« Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks »*
— ICOSAHOM 2025, Montréal – juillet 2025 : *« Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks »*
— DTE & AICOMAS 2025, Paris – 20 février 2025 : *« Combining Finite Element Methods and Neural Networks to Solve Elliptic Problems on 2D Geometries »*
— Exama project, WP2 reunion – 26 mars 2024 : *« How to work with complex geometries in PINNs ? »*

— Retraite (Macaron/Tonus) – 6 février 2024 : *« Mesh-based methods and physically informed learning »*
— Réunion d'équipe (Mimesis) – 12 décembre 2023 : *« Development of hybrid finite element/neural network methods to help create digital surgical twins »*

Posters :

— EMS-TAG-SciML 2025, Milan – 24 mars 2025 : *« Enriching continuous Lagrange finite element approximation spaces using neural networks »*
— CJC-MA 2024, Lyon – 29 octobre 2024 : *« Combining Finite Element Methods and Neural Networks to Solve Elliptic Problems on 2D Geometries »*
— Journée poster MSII, Strasbourg – 24 octobre 2024
— SciML 2024, Strasbourg – 8 juillet 2024