

**BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM**

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



Phạm Vũ Hoàng Sơn

**PHƯƠNG PHÁP RITZ SỬ DỤNG HỌC SÂU (DEEP LEARNING)
CHO BÀI TOÁN BIẾN PHÂN TRONG PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC**

LUẬN VĂN THẠC SĨ TOÁN ỨNG DỤNG

Hà Nội - 2023

**BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM HỌC**

VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



PHẠM VŨ HOÀNG SƠN

**PHƯƠNG PHÁP RITZ SỬ DỤNG HỌC SÂU
(DEEP LEARNING) CHO BÀI TOÁN BIẾN PHÂN
TRONG PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC**

LUẬN VĂN THẠC SĨ TOÁN ỨNG DỤNG

Mã số: 8460112

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

GS.TSKH Đinh Nho Hào

Hà Nội - 2023

LỜI CAM ĐOAN

Luận văn này được thực hiện dựa trên sự tìm tòi, học hỏi của cá nhân tôi dưới sự hướng dẫn của thầy Đinh Nho Hào. Mọi sự giúp đỡ cho việc thực hiện luận văn này đã được cảm ơn và các thông tin trích dẫn trong luận văn đều được ghi rõ nguồn gốc. Tôi xin chịu trách nhiệm về những lời cam đoan.

Hà Nội, tháng 10 năm 2023

Học viên

Sơn

Phạm Vũ Hoàng Sơn

LỜI CẢM ƠN

Đầu tiên, tôi xin gửi lời cảm ơn tới thầy hướng dẫn của tôi GS.TSKH. Đinh Nho Hào, thầy không chỉ giúp đỡ tôi hoàn thành luận văn một cách tốt nhất mà còn luôn quan tâm và chỉ bảo tôi trong cuộc sống.

Tiếp theo tôi xin gửi lời cảm ơn tới quỹ đổi mới sáng tạo (VINIF) đã tài trợ học bổng cho tôi, giúp tôi có thể tập trung hoàn toàn vào việc học tập, nghiên cứu để hoàn thành tốt nhất chương trình thạc sĩ của mình.

Tôi cũng xin cảm ơn Trung tâm đào tạo sau đại học Viện Toán học và Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đã tạo ra một môi trường học tập, nghiên cứu tốt nhất trong suốt quá trình tôi học tập cũng như thực hiện luận văn này. Bên cạnh đó tôi xin gửi lời cảm ơn tới anh Dương Xuân Hiệp, anh Văn Bá Công, em Nguyễn Quang Huy - những người bạn cũng như người đồng môn đã hỗ trợ tôi trong quá trình tìm hiểu cũng như giải đáp các vấn đề về lý thuyết trong luận văn.

Đặc biệt, tôi xin gửi lời cảm ơn tới gia đình của tôi, những người đã luôn làm việc chăm chỉ để tôi có thể thực hiện ước mơ của mình. Cảm ơn tình yêu thương vô điều kiện của bố, mẹ và tôi tin họ luôn tự hào về hành trình của tôi.

Son
Phạm Văn Hoàng Sơn

Mục lục

Lời cam đoan	i
Lời cảm ơn	ii
Mục lục	iii
Danh mục các hình vẽ, đồ thị	vi
Mở đầu	1
0 Một số kiến thức chuẩn bị	3
0.1 Giải tích hàm	3
0.2 Phương trình đạo hàm riêng	8
0.3 Lí thuyết tối ưu	11
1 Bài toán biến phân	16
1.1 Bài toán điều kiện biên Dirichlet thuần nhất	16
1.2 Bài toán điều kiện biên Dirichlet không thuần nhất	22
1.3 Bài toán điều kiện biên Neumann thuần nhất	23
2 Phương pháp giải	26

2.1	Phương pháp Ritz cổ điển	26
2.2	Phương pháp Ritz sử dụng học sâu (deep learning)	29
2.2.1.	Tổng quan về Deep Learning	29
2.2.2.	Phương pháp Ritz sử dụng học sâu	32
2.2.3.	Thuật toán Monte Carlo trong xấp xỉ tích phân	34
3	Một số ví dụ	36
3.1	Ví dụ 1	36
3.2	Ví dụ 2	40
3.3	Ví dụ 3	45
3.4	Ví dụ 4	47
3.5	Nhận xét kết quả của ví dụ	48
	Kết luận và kiến nghị	50
	Tài liệu tham khảo	51

Danh sách hình vẽ

2.1	Cấu trúc mạng nơ-ron đơn giản.	31
2.2	Cấu trúc mạng nơ-ron được sử dụng trong phương pháp Ritz với 2 khối	34
3.1	So sánh kết quả của mạng nơ-ron (trái) và nghiệm chính xác (phải) trong ví dụ 1.	38
3.2	Sai số của mô hình với 5 khối so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.	38
3.3	Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron 5 khối trong ví dụ 1.	39
3.4	Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.	39
3.5	Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.	40
3.6	So sánh kết quả của mạng nơ-ron (trái) và nghiệm chính xác (phải) trong ví dụ 2.	42
3.7	Sai số của mô hình với 2 khối so với nghiệm chính xác trong ví dụ 2.	42
3.8	Phương pháp sai phân hữu hạn và sai số trong ví dụ 2.	43
3.9	Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron 2 khối trong ví dụ 2.	43
3.10	Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 2.	44
3.11	Kết quả của mạng nơ-ron trong ví dụ 3.	46

3.12	Phương pháp sai phân hữu hạn trong ví dụ 3.	46
3.13	Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron trong ví dụ 3. . . .	46
3.14	Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron trong ví dụ 4. . . .	48

MỞ ĐẦU

Phương pháp Ritz

Phương pháp Ritz [1, 2, 3] là phương pháp xấp xỉ nghiệm của bài toán biên cho phương trình vi phân bằng cách biểu diễn nó dưới dạng tổ hợp tuyến tính các hàm cơ sở. Trong phương pháp này, các công cụ cổ điển thường là phương pháp phần tử hữu hạn hoặc sai phân hữu hạn. Tuy nhiên, với các phương pháp này, số bậc tự do tăng theo hàm mũ khi số chiều của phương trình tăng.

Trong những năm gần đây, học sâu đã đạt được một số thành tựu lớn trong nhiều lĩnh vực như thị giác máy tính, nhận diện giọng nói và xử lý ngôn ngữ tự nhiên nhờ vào mạng nơ-ron sâu (Deep Neural Networks). Không chỉ vậy, các mạng này còn có thể được sử dụng để giải các phương trình đạo hàm riêng. Một ưu điểm rất lớn của các mạng này là số bậc tự do không tăng theo hàm mũ. Vậy nên, chúng rất thích hợp để giải các phương trình đạo hàm riêng nhiều chiều.

Trong phương pháp Ritz sâu, học sâu được sử dụng để ước lượng giá trị của các hàm số, giúp giải bài toán biên phân một cách chính xác hơn. Kết quả của các thử nghiệm số trên máy tính cho thấy tính hiệu quả của phương pháp so với các phương pháp số truyền thống, cho thấy nó có thể là một phương pháp hữu ích để giải các bài toán biên phân lớp phương trình elliptic trong nhiều lĩnh vực khác nhau.

Phương pháp Ritz sâu được Weinen E và Bing Yu đề xuất vào năm 2018 [1] và kể từ đó tới nay đã được rất nhiều công trình trích dẫn [2, 3, 4, 5]; phương

pháp này đã được cải biến và ứng dụng để giải nhiều phương trình elliptic khác nhau trong thực tiễn. Các kết quả số cho thấy phương pháp hữu hiệu cho các bài toán phi tuyến, có tính kỳ dị cao và đặc biệt là các bài toán có số chiều cao. Rất đáng tiếc là các nghiên cứu thú vị này chưa được phát triển ở Việt Nam, nên chúng tôi muốn tiếp cận với chủ đề này, cũng như xem xét khả năng ứng dụng của phương pháp cho các bài toán biến phân khác nhau.

Đối tượng nghiên cứu của luận văn

Trong luận văn này, tôi áp dụng phương pháp Ritz sâu cho một số bài toán biên Dirichlet và Neumann lớp phương trình đạo hàm riêng dạng elliptic.

Trong các thuật toán cổ điển, các điều kiện biên có thể được ràng buộc chính xác bởi các điểm lưới trên biên. Tuy nhiên, các điều kiện này lại rất khó để biểu diễn trong các mạng nơ-ron. Các điều kiện này thường có nhiều cách xử lý, một trong số đó là thêm 1 số hạng phạt vào các hàm mất mát để giảm sai số tuyệt đối. Thường các số hạng phạt này được biểu diễn theo chuẩn L^2 . Trong luận văn này, tôi sẽ đưa ra các ví dụ số cụ thể cho các trường hợp này, tuy nhiên sẽ tập trung vào trường hợp tổng quát là số hạng phạt.

Bố cục luận văn

Luận văn được viết dựa theo tài liệu [6, 7, 8] và được trình bày theo bố cục:

Chương 0: Một số kiến thức chuẩn bị.

Chương 1: Giới thiệu về phương pháp biến phân giải phương trình elliptic.

Chương 2: Giới thiệu các phương pháp giải bài toán biên phân: phương pháp Ritz cổ điển, phương pháp Ritz sâu.

Chương 3: Một số kết quả thu được.

Chương 0

Một số kiến thức chuẩn bị

0.1 Giải tích hàm

Trong chương này, tôi kí hiệu $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ là một tập hợp

Định nghĩa 0.1. \mathcal{M} là một σ -đại số trong Ω nếu thoả mãn \mathcal{M} là một họ các tập con của Ω thoả mãn

1. $\emptyset \in \mathcal{M}$,
2. $A \in \mathcal{M} \Rightarrow A^c \in \mathcal{M}$,
3. $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{M}$ với $A_n \in \mathcal{M}, \forall n$.

Định nghĩa 0.2. μ là một độ đo trên Ω nếu σ -đại số \mathcal{M} trong Ω ta có $\mu : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$ thoả mãn

1. $\mu(\emptyset) = 0$
2. $\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n)$ với (A_n) là họ các tập rời nhau trong \mathcal{M} .
Những tập hợp trong \mathcal{M} được gọi là những tập đo được.

Định nghĩa 0.3. Ω là một σ -hữu hạn nếu tồn tại một họ đếm được (Ω_n) trong σ -đại số \mathcal{M} của Ω thoả mãn $\Omega = \bigcup_{n=1}^{\infty} \Omega_n$ và $\mu(\Omega_n) < \infty, \forall n$.

Ta gọi bộ $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$, \mathcal{M} là một σ -đại số trong Ω , μ là một độ đo trên Ω , Ω là một σ -hữu hạn là một không gian đo.

Tập $E \in \mathcal{M}$ thoả mãn $\mu(E) = 0$ được gọi là tập có độ đo không. Ta nói một tính chất được gọi là đúng hầu khắp nơi nếu nó đúng trên mọi điểm thuộc Ω trừ những điểm thuộc tập có độ đo không.

Định nghĩa 0.4. Ta gọi $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm đo được nếu:

$$f^{-1}(U) \in \mathcal{M},$$

với mỗi tập mở $U \subset \mathbb{R}$.

Xét các hàm đơn giản ψ đo được trên tập E là các hàm số nhận hữu hạn các giá trị thực. Nếu ψ nhận n giá trị phân biệt a_1, \dots, a_n trên E thì do tính đo được của ψ nên $\psi^{-1}(a_i)$ là đo được và ta có biểu diễn của ψ trên E là

$$\psi = \sum_{i=1}^n a_i \chi_{E_i}$$

với $E_i = \psi^{-1}(a_i) = \{x \in E | \psi(x) = a_i\}$.

Và ta định nghĩa tích phân của ψ trên tập E có độ đo hữu hạn bởi

$$\int_E \psi = \sum_{i=1}^n a_i \cdot m(E_i).$$

Cho f là một hàm giá trị thực bị chặn trên tập E có độ đo hữu hạn. Ta lần lượt định nghĩa tích phân Lebesgue dưới và trên của f trên E như sau

$$\sup \left\{ \int_E \varphi \mid \varphi \text{ là hàm đơn giản và } \varphi \leq f \text{ trên } E \right\}$$

và

$$\inf \left\{ \int_E \psi \mid \psi \text{ là hàm đơn giản và } \psi \geq f \text{ trên } E \right\}$$

Định nghĩa 0.5. Một hàm số f bị chặn trên miền E có độ đo hữu hạn được gọi là khả tích Lebesgue trên E nếu tích phân Lebesgue dưới và trên của nó bằng nhau. Giá trị đó được gọi là tích phân Lebesgue (hay tích phân) của f trên E .

Ta kí hiệu không gian những hàm $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ khả tích Lebesgue là $L^1(\Omega, \mu)$ hoặc $L^1(\Omega)$ hoặc L^1 . Ta trang bị chuẩn

$$\|f\|_{L^1} = \|f\|_1 = \int_{\Omega} |f| d\mu = \int |f|$$

Định nghĩa 0.6. Cho $p \in \mathbb{R}$ với $1 < p < \infty$, gọi

$$L^p(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; f \text{ là hàm đo được và } \|f\|^p \in L^1(\Omega) \right\}$$

với

$$\|f\|_{L^p} = \|f\|_p = \left[\int_{\Omega} |f(x)|^p d\mu \right]^{\frac{1}{p}}$$

Định nghĩa 0.7. Kí hiệu

$$L^\infty(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ đo được và bị chặn hầu khắp nơi trên } \Omega \right\}$$

với

$$\|f\|_{L^\infty} = \|f\|_\infty = \inf \left\{ C; |f(x)| \leq C \text{ hầu khắp nơi trên } \Omega \right\}$$

Định lí 0.8. (Bất đẳng thức Holder) Cho $f \in L^p$ và $g \in L^{p'}$ với $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$ và $1 \leq p \leq \infty$. Khi đó $fg \in L^1$ và

$$\int |fg| \leq \|f\|_p \|g\|_{p'}$$

Định lí 0.9. (Định lý Fischer-Riesz) L^p là không gian Banach với mọi $1 \leq p \leq \infty$.

Ta kí hiệu E^* là không gian đối ngẫu của không gian định chuẩn E , nghĩa là không gian của tất cả các hàm tuyến tính liên tục trên E với chuẩn

$$\|f\|_{E^*} = \sup_{\substack{\|x\| \leq 1 \\ x \in E}} |f(x)| = \sup_{\substack{\|x\| \leq 1 \\ x \in E}} f(x)$$

và kí hiệu

$$\langle f, x \rangle = f(x).$$

Định nghĩa 0.10. Cho $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ là một tập mở và $1 \leq p \leq \infty$. Ta nói một hàm số $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ thuộc $L^p_{loc}(\Omega)$ nếu $f\chi_K \in L^p(\Omega)$ với mỗi tập compact K trong Ω , với χ_K được định nghĩa như sau

$$\chi_K(x) = \begin{cases} 1 & \text{nếu } x \in K \\ 0 & \text{nếu } x \in \Omega \setminus K \end{cases}.$$

Mệnh đề 0.11. Với $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ là một tập mở và $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ thoả mãn

$$\int u f = 0 \quad \forall f \in C_c^\infty(\Omega).$$

Khi đó $u = 0$ hầu khắp nơi trên Ω .

Định nghĩa 0.12. Cho H là một không gian vector. Một tích vô hướng (u, v) là một dạng song tuyến tính trên $H \times H$ nhận giá trị trên \mathbb{R} thoả mãn

$$(u, v) = (v, u), \forall u, v \in H,$$

$$(u, u) \geq 0, \forall u \in H,$$

$$(u, u) \neq 0, \forall u \neq 0.$$

Tích vô hướng thoả mãn bất đẳng thức Cauchy-Schwarz

$$|(u, v)| \leq (u, u)^{1/2}(v, v)^{1/2}, \forall u, v \in H.$$

Khi đó, $\|u\| = (u, u)^{1/2}$ là một chuẩn.

Định nghĩa 0.13. Không gian Hilbert là không gian vector H được trang bị một tích vô hướng sao cho H là đầy theo chuẩn $\|\cdot\|$.

Định lí 0.14. (Phép chiếu lên tập lồi đóng) Cho $K \subset H$ (H là không gian Hilbert) là một tập lồi đóng khác rỗng. Khi đó với mỗi $f \in H$, tồn tại duy nhất $u \in K$ sao cho

$$\|f - u\| = \min_{v \in K} \|f - v\|$$

Hơn nữa, u được xác định bởi

$$u \in K \text{ và } (f - u, v - u) \leq 0, \forall v \in K$$

Kí hiệu $u = P_K f$

Định lí 0.15. (Biểu diễn Riesz-Fréchet cho không gian Hilbert) Cho $\varphi \in H^*$ bất kì, tồn tại duy nhất $f \in H$ thoả mãn

$$\langle \varphi, u \rangle = (f, u), \forall u \in H$$

Hơn nữa,

$$\|f\| = \|\varphi\|_{H^*}$$

Định nghĩa 0.16. Cho không gian Hilbert H . Một dạng song tuyến tính $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ được gọi là

1. liên tục nếu tồn tại một hằng số C thoả mãn

$$|a(u, v)| \leq C \|u\| \|v\|, \forall u, v \in H$$

2. bức nếu tồn tại hằng số $\alpha > 0$ thoả mãn

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|^2, \forall v \in H$$

Định lí 0.17. (Nguyên lý ánh xạ co) Cho X là một không gian metric đầy khác rỗng và $S : X \rightarrow X$ là một phép co ngặt, nghĩa là,

$$d(Sv_1, Sv_2) \leq kd(v_1, v_2), \forall v_1, v_2 \in X \text{ với } k < 1.$$

Khi đó S có một điểm bất động duy nhất, $u = Su$.

Mệnh đề 0.18. Với $K \subset H$ là một tập lồi đóng khác rỗng thì P_K là ánh xạ không giãn, nghĩa là

$$\|P_K f_1 - P_K f_2\| \leq \|f_1 - f_2\|, \forall f_1, f_2 \in H$$

0.2 Phương trình đạo hàm riêng

Ta kí hiệu không gian các hàm số liên tục trên tập Ω là $C(\Omega)$, không gian hàm số khả vi liên tục k lần trên Ω là $C^k(\Omega)$ và $C^\infty(\Omega) = \bigcap_{k \geq 0} C^k$. Định nghĩa

$$C_c(\Omega) = \{f \in C(\Omega) : f(x) = 0, \forall x \in \Omega \setminus K, K \text{ là tập compact}\}$$

và C_c^k tương tự.

Với $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ là một tập mở và $p \in \mathbb{R}, 1 \leq p \leq \infty$.

Định nghĩa 0.19. Không gian Sobolev $W^{1,p}(\Omega)$ được định nghĩa như sau

$$W^{1,p}(\Omega) = \left\{ u \in L^p(\Omega) \left| \begin{array}{l} \exists g_1, g_2, \dots, g_N \in L^p(\Omega) \text{ thoả mãn} \\ \int_{\Omega} u \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx = - \int_{\Omega} g_j \varphi dx, \\ \forall \varphi \in C_c^\infty(\Omega), \forall i = 1, 2, \dots, N \end{array} \right. \right\}$$

Ta đặt $H^1(\Omega) = W^{1,2}(\Omega)$. Với $u \in W^{1,p}(\Omega)$, ta định nghĩa $\frac{\partial u}{\partial x_i} = g_i$ và ta viết

$$\nabla u = \text{grad} u = \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_N} \right)$$

Không gian $W^{1,p}(\Omega)$ được trang bị chuẩn

$$\|u\|_{W^{1,p}} = \|u\|_p + \sum_{i=1}^N \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_p$$

hoặc chuẩn tương đương $\left(\|u\|_p^p + \sum_{i=1}^N \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_p^p \right)^{1/p}$ (nếu $1 \leq p < \infty$).

Không gian $H^1(\Omega)$ được trang bị tích vô hướng

$$(u, v)_{H^1} = (u, v)_{L^2} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{L^2} = \int_{\Omega} uv + \sum_{i=1}^N \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx$$

Chuẩn tương ứng

$$\|u\|_{H^1} = \left(\|u\|_2^2 + \sum_{i=1}^N \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_2^2 \right)^{1/2}$$

tương đương với chuẩn của $W^{1,2}$.

Mệnh đề 0.20. $W^{1,p}(\Omega)$ là một không gian Banach với $1 \leq p \leq \infty$. $H^1(\Omega)$ là một không gian Hilbert.

Mệnh đề 0.21. (Đạo hàm của một tích) Với $u, v \in W^{1,p}(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$ với $1 \leq p \leq \infty$. Khi đó $uv \in W^{1,p}(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$ và

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(uv) = \frac{\partial u}{\partial x_i}v + u \frac{\partial v}{\partial x_i}, i = 1, 2, \dots, N$$

Mệnh đề 0.22. (Đạo hàm của hàm hợp) Với $G \in C^1(\mathbb{R})$ thoả mãn $G(0) = 0$ và $|G'(s)| \leq M, \forall s \in \mathbb{R}$ với hằng số M nào đó, $u \in W^{1,p}(\Omega)$ với $1 \leq p \leq \infty$. Khi đó

$$G \circ u \in W^{1,p}(\Omega) \text{ và } \frac{\partial}{\partial x_i}(G \circ u) = (G' \circ u) \frac{\partial u}{\partial x_i}, i = 1, 2, \dots, N$$

Mệnh đề 0.23. (Quy tắc đổi biến) Với Ω, Ω' là 2 tập mở trong \mathbb{R}^N và $H : \Omega' \rightarrow \Omega$ là một song ánh, $x = H(y)$, sao cho $H \in C^1(\Omega'), H^{-1} \in C^1(\Omega)$,

$Jac H \in L^\infty(\Omega')$, $Jac H^{-1} \in L^\infty(\Omega)$ với $Jac H$ là ma trận Jacobi của H , $u \in W^{1,p}(\Omega)$ với $1 \leq p \leq \infty$. Khi đó $u \circ H \in W^{1,p}(\Omega')$ và

$$\frac{\partial}{\partial y_j} u(H(y)) = \sum_i \frac{\partial u}{\partial x_i}(H(y)) \frac{\partial H_i}{\partial y_j}(y), \forall j = 1, 2, \dots, N$$

Định nghĩa 0.24. Với $m \in \mathbb{Z}$, $m \geq 2$, p là số thực với $1 \leq p < \infty$. Ta định nghĩa

$$W^{m,p}(\Omega) = \left\{ u \in L^p(\Omega) \left| \begin{array}{l} \forall \alpha : |\alpha| \leq m, \exists g_\alpha \in L^p(\Omega) \\ \int_\Omega u D^\alpha \varphi dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega g_\alpha \varphi dx, \forall \varphi \in C_c^\infty(\Omega) \end{array} \right. \right\}$$

với $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ với $\alpha_i \geq 0$ nguyên, $|\alpha| = \sum_{i=1}^N \alpha_i$ và $D^\alpha \varphi = \frac{\partial^{|\alpha|} \varphi}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_N^{\alpha_N}}$.

Đặt $D^\alpha u = g_\alpha$. Không gian $W^{m,p}(\Omega)$ được trang bị chuẩn

$$\|u\|_{W^{m,p}} = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_p$$

là một không gian Banach. Không gian $H^m(\Omega) = W^{m,2}(\Omega)$ được trang bị tích vô hướng

$$(u, v)_{H^m} = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} (D^\alpha u, D^\alpha v)_{L^2}$$

là một không gian Hilbert.

Định nghĩa 0.25. Với $1 \leq p < \infty$, $W_0^{1,p}(\Omega)$ là bao đóng của $C_c^1(\Omega)$ trong $W^{1,p}(\Omega)$. Đặt $H_0^1(\Omega) = W_0^{1,2}(\Omega)$

Không gian $W_0^{1,p}$ được trang bị chuẩn của không gian $W^{1,p}$ là một không gian Banach, H_0^1 được trang bị tích vô hướng của H^1 là một không gian Hilbert.

Định lí 0.26. Giả sử rằng Ω thuộc lớp C^1 . Cho

$$u \in W^{1,p}(\Omega) \cap C(\bar{\Omega}) \text{ với } 1 \leq p < \infty.$$

$u = 0$ trên $\Gamma = \partial\Omega$ khi và chỉ khi $u \in W_0^{1,p}(\Omega)$.

Định lí 0.27. (Poincaré-Steklov) Cho D là một miền Lipschitz trong \mathbb{R}^d . Gọi ℓ_D là đường kính của D . Với $p \in [1, \infty]$, tồn tại C sao cho

$$C \|v - \underline{v}_D\|_{L^p(D)} \leq \ell_D \|v\|_{W^{1,p}(D)}, \quad \forall v \in W^{1,p}(D),$$

với $\underline{v}_D := \frac{1}{|D|} \int_D v \, dx$. Khi D lồi:

- Nếu $p = 1$, $C = 2$.
- Nếu $p = 2$, $C = \pi$
- Nếu $p > 1$, $C \geq \frac{1}{2} \left(\frac{2}{p}\right)^{\frac{1}{p}}$

0.3 Lí thuyết tối ưu

Xét bài toán tối ưu không ràng buộc

$$\min_{x \in C} f(x).$$

với $f : C \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ là một hàm liên tục.

Định lí 0.28. $C \subseteq \mathbb{R}^n$ là tập đóng khác rỗng, hàm số $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ khả vi tại điểm $\bar{\theta} \in \text{int}(C)$. Nếu f đạt cực tiểu địa phương tại $\bar{\theta}$ thì

$$\nabla f(\bar{\theta}) = 0.$$

Định nghĩa 0.29. Với $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ là một hàm khả vi liên tục trên \mathbb{R} . Một vector $d \in \mathbb{R}^n$, $d \neq 0$ được gọi là hướng giảm của f tại θ nếu đạo hàm theo hướng $f'(\theta; d)$ âm, nghĩa là $f'(\theta; d) = \nabla f(\theta)^T d < 0$.

Phương pháp hướng giảm (descent direction) là một phương pháp lặp, tại mỗi bước lặp, θ thay đổi theo hướng giảm một bước đủ nhỏ để làm giảm $f(\theta)$.

Phương pháp gradient là phương pháp hướng giảm với hướng giảm tại bước

Algorithm 1 Phương pháp hướng giảm

Require: Điểm khởi tạo $\theta^0 \in \mathbb{R}^n$, ngưỡng hội tụ ε .

Ensure: Cực tiểu cục bộ θ^*

```

1:  $k \leftarrow 0$ 
2: while True do
3:   Chọn một hướng giảm  $d^k$ .
4:   Tìm cỡ bước  $t^k$  thỏa mãn  $f(\theta^k + t^k d^k) < f(\theta^k)$ .
5:   Cập nhật:  $\theta^{k+1} \leftarrow \theta^k + t^k d^k$ 
6:   if  $\|\theta^{k+1} - \theta^k\|_{\mathbb{R}^n} \leq \varepsilon$  then
7:     Break
8:   end if
9:    $k \leftarrow k + 1$ 
10: end while
11: return  $\theta^{k+1}$ 

```

k được chọn bằng $-\nabla f(\theta^k)$.

Phương pháp gradient descent (GD) là phương pháp gradient với cỡ bước t^k được cố định bằng α tại tất cả các bước.

Phương pháp stochastic gradient descent (SGD) là một biến thể của gradient descent, trong đó gradient được tính dựa trên một tập con ngẫu nhiên của dữ liệu, thay vì sử dụng toàn bộ dữ liệu.

Algorithm 2 Phương pháp gradient

Require: Điểm khởi tạo $\theta^0 \in \mathbb{R}^n$, ngưỡng hội tụ ε , tập điểm dữ liệu $\mathbf{x} = \{x_i\}$ với $i = 1, 2, \dots, N$.**Ensure:** Cục tiểu cục bộ θ^*

```

1:  $k \leftarrow 0$ 
2: while True do
3:   Tính gradient dựa trên cả tập dữ liệu:  $\nabla f(\theta^k; \mathbf{x})$ 
4:   Chọn một cỡ bước  $t^k$  qua một quá trình tìm kiếm theo đường.
5:   Cập nhật:  $\theta^{k+1} \leftarrow \theta^k - t^k \nabla f(\theta^k)$ .
6:   if  $\|\theta^{k+1} - \theta^k\|_{\mathbb{R}^n} \leq \varepsilon$  then
7:     Break
8:   end if
9:    $k \leftarrow k + 1$ 
10: end while
11: return  $\theta^{k+1}$ 

```

Algorithm 3 Gradient Descent

Require: Điểm khởi tạo $\theta^0 \in \mathbb{R}^n$, ngưỡng hội tụ ε , tập điểm dữ liệu $\mathbf{x} = \{x_i\}$ với $i = 1, 2, \dots, N$,
tốc độ học α .**Ensure:** Cục tiểu cục bộ θ^*

```

1:  $k \leftarrow 0$ 
2: while True do
3:   Tính gradient dựa trên cả tập dữ liệu:  $\nabla f(\theta^k; \mathbf{x})$ 
4:   Cập nhật:  $\theta^{k+1} \leftarrow \theta^k - \alpha \nabla f(\theta^k, \mathbf{x})$ 
5:   if  $\|\theta^{k+1} - \theta^k\|_{\mathbb{R}^n} \leq \varepsilon$  then
6:     Break
7:   end if
8:    $k \leftarrow k + 1$ 
9: end while
10: return  $\theta^{k+1}$ 

```

Phương pháp Adam là một biến thể nâng cao của SGD. Trong khi SGD chỉ cần một tốc độ học cố định, Adam sử dụng ước lượng trung bình động (moving average) của gradient và bình phương của gradient để điều chỉnh tốc

Algorithm 4 Phương pháp stochastic gradient descent

Require: Điểm khởi tạo $\theta^0 \in \mathbb{R}^n$, ngưỡng hội tụ ε , tập điểm dữ liệu $\mathbf{x} = \{x_i\}$ với $i = 1, 2, \dots, N$,
tốc độ học α .

Ensure: Cực tiểu cục bộ θ^*

```
1:  $k \leftarrow 0$ 
2: while True do
3:   Lựa chọn ngẫu nhiên một điểm dữ liệu  $x_i$  từ tập dữ liệu.
4:   Tính gradient dựa trên điểm dữ liệu đã chọn:  $\nabla f(\theta^k; x_i)$ 
5:   Cập nhật:  $\theta^{k+1} \leftarrow \theta^k - \alpha \nabla f(\theta^k, x_i)$ 
6:   if  $\|\theta^{k+1} - \theta^k\|_{\mathbb{R}^n} \leq \varepsilon$  then
7:     Break
8:   end if
9:    $k \leftarrow k + 1$ 
10: end while
11: return  $\theta^{k+1}$ 
```

độ học trong quá trình tối ưu. Điều này giúp thuật toán hội tụ nhanh hơn và ít phụ thuộc vào việc chọn tốc độ học ban đầu. [9]

Algorithm 5 Phương pháp Adam

Require: Điểm khởi tạo $\theta^0 \in \mathbb{R}^n$, ngưỡng hội tụ ε , tập điểm dữ liệu $\mathbf{x} = \{x_i\}$ với $i = 1, 2, \dots, N$,
tốc độ học α , các tham số β_1, β_2 .

Ensure: Cực tiểu cục bộ θ^*

```

1:  $k \leftarrow 0$ 
2: while True do
3:   Lựa chọn ngẫu nhiên một tập con điểm dữ liệu  $\mathbf{x}'$  từ tập dữ liệu  $\mathbf{x}$ .
4:   Tính gradient dựa trên tập điểm dữ liệu đã chọn:  $g^k = \nabla f(\theta^k; \mathbf{x}')$ 
5:   Cập nhật:
6:      $m^{k+1} \leftarrow \beta_1 m^k + (1 - \beta_1)g^k$ 
7:      $v^{k+1} \leftarrow \beta_2 v^k + (1 - \beta_2)(g^k)^2$ 
8:      $\hat{m}^{k+1} \leftarrow \frac{m^{k+1}}{1 - \beta_1^{k+1}}$ 
9:      $\hat{v}^{k+1} = \frac{v^{k+1}}{1 - \beta_2^{k+1}}$ 
10:     $\theta^{k+1} = \theta^k - \alpha \frac{\hat{m}^{k+1}}{\sqrt{\hat{v}^{k+1} + \epsilon}}$ 
11:    if  $\|\theta^{k+1} - \theta^k\|_{\mathbb{R}^n} \leq \varepsilon$  then
12:      Break
13:    end if
14:     $k \leftarrow k + 1$ 
15: end while
16: return  $\theta^{k+1}$ 

```

Giả sử f khả vi liên tục và ∇f là liên tục Lipschitz với hằng số L trên \mathbb{R}^n .

Bổ đề 0.30. Với $x, y \in \mathbb{R}^n$

$$f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{L}{2}\|x - y\|^2$$

Bổ đề 0.31. $\{x_k\}$ là dãy sinh bởi phương pháp gradient giải bài toán

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

với cỡ bước bằng $t_k = t \in (0, \frac{1}{2L})$, khi đó, với $M = t \left(1 - \frac{tL}{2}\right)$,

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq M \|\nabla f(x_k)\|^2$$

Chương 1

Bài toán biên phân

1.1 Bài toán điều kiện biên Dirichlet thuần nhất

Xét bài toán Dirichlet thuần nhất cho toán tử Laplace. Cho $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ là một tập mở bị chặn. Ta cần tìm một hàm số $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ thỏa mãn

$$\begin{cases} -\Delta u = f \text{ trong } \Omega, \\ u = 0 \text{ trên } \Gamma = \partial\Omega \end{cases} \quad (1.1)$$

với

$$\Delta u = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \text{ là toán tử Laplace của } u$$

và f là một hàm cho trước trên Ω . Điều kiện biên $u = 0$ trên Γ được gọi là điều kiện biên Dirichlet (thuần nhất).

Nhân (1.1) với $v \in H_0^1(\Omega)$ và lấy tích phân từng phần, ta được

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \quad (1.2)$$

với $\nabla u \cdot \nabla v = \sum_{i=1}^N \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i}$. Ta thấy trong (1.2), u chỉ cần thỏa mãn có đạo hàm yếu cấp 1, có nghĩa là $u \in H^1(\Omega)$. Cùng với điều kiện biên ở (1.1), ta có $u \in H_0^1(\Omega)$. Từ đó ta xây dựng các định nghĩa về nghiệm yếu của (1.1).

Định nghĩa 1.1. Một nghiệm mạnh của (1.1) là một hàm số $u \in C^2(\overline{\Omega})$ thỏa mãn (1.1). Một nghiệm yếu của (1.1) là một hàm số $u \in H_0^1(\Omega)$ thỏa mãn

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

$$\text{với } \nabla u \cdot \nabla v = \sum_{i=1}^N \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i}$$

Từ đây, ta có cách tiếp cận bài toán theo hướng biến phân, gồm các bước như sau.

Bước 1: Chứng minh mỗi nghiệm mạnh là một nghiệm yếu. Thật vậy, với $u \in H^1(\Omega) \cap C^2(\overline{\Omega})$ và $u = 0$ trên Γ thì $u \in H_0^1(\Omega)$. Mặt khác, nếu $v \in C_c^1(\Omega)$ ta có

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx$$

và bởi tính trừ mật nên điều này đúng với mọi $v \in H_0^1(\Omega)$.

Bước 2: Chứng minh sự tồn tại và duy nhất của nghiệm yếu.

Để chứng minh điều này, ta sẽ cần định lý quan trọng Lax-Milgram. Tuy nhiên, ta sẽ chứng minh định lý Stampacchia là trường hợp tổng quát của Lax-Milgram.

Định lý 1.2. (Định lý Stampacchia) Với $a(u, v)$ là một dạng song tuyến tính liên tục bậc trên không gian Hilbert H với tích vô hướng (\cdot, \cdot) và chuẩn $|\cdot|$, $K \subset H$ là một tập con khác rỗng lồi đóng. Khi đó, với mỗi $\varphi \in H^*$, tồn tại duy nhất $u \in K$ thỏa mãn

$$a(u, v - u) \geq \langle \varphi, v - u \rangle, \quad \forall v \in K.$$

Hơn nữa, nếu a đối xứng thì u được xác định bởi

$$u \in K \text{ và } \frac{1}{2}a(u, u) - \langle \varphi, u \rangle = \min_{v \in K} \left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle \right\}.$$

Chứng minh. Từ biểu diễn Riesz-Fréchet trong không gian Hilbert, tồn tại duy nhất $f \in H$ sao cho

$$\langle \varphi, v \rangle = (f, v), \forall v \in H.$$

Mặt khác, nếu ta cố định $u \in H$, ánh xạ $v \mapsto a(u, v)$ là một ánh xạ tuyến tính liên tục trên H . Áp dụng biểu diễn Riesz-Fréchet một lần nữa, ta tìm được duy nhất $Au \in H$, sao cho $a(u, v) = (Au, v), \forall v \in H$. Cụ thể A là một toán tử tuyến tính từ H vào H thoả mãn

$$\begin{aligned} \|Au\| &\leq C \|u\|, \forall u \in H, \\ (Au, u) &\geq \alpha \|u\|^2, \forall u \in H. \end{aligned}$$

Mục tiêu của định lí là tìm $u \in K$ sao cho

$$(Au, v - u) \geq (f, v - u), \forall v \in K$$

hoặc

$$(\rho f - \rho Au + u - u, v - u) \leq 0, \forall v \in K$$

hoặc do tính chất của hình chiếu trực giao lên một tập hợp lồi đóng,

$$u = P_K(\rho f - \rho Au + u)$$

với $\rho > 0$ là một hằng số (sẽ được xác định sau), $P_K(\rho f - \rho Au + u)$ là hình chiếu của $\rho f - \rho Au + u$ trên K .

Với mỗi $v \in K$, đặt $Sv = P_K(\rho f - \rho Av + v)$. Ta thấy rằng có thể chọn $\rho > 0$ sao cho S là phép co ngặt. Thật vậy, vì P_K không giãn, ta có

$$\|Sv_1 - Sv_2\| \leq \|(v_1 - v_2) - \rho(Av_1 - Av_2)\|$$

và vì vậy

$$\begin{aligned}\|Sv_1 - Sv_2\|^2 &\leq \|v_1 - v_2\|^2 - 2\rho(Av_1 - Av_2, v_1 - v_2) + \rho^2 \|Av_1 - Av_2\|^2 \\ &\leq \|v_1 - v_2\|^2 (1 - 2\rho\alpha + \rho^2 C^2).\end{aligned}$$

Chọn $\rho > 0$ để $k^2 = 1 - 2\rho\alpha + \rho^2 C^2 < 1$, nghĩa là $0 < \rho < 2\alpha/C^2$, ta thấy S có điểm bất động duy nhất.

Giả sử dạng song tuyến tính $a(u, v)$ đối xứng. Khi đó $a(u, v)$ định nghĩa một tích vô hướng mới trên H , tương ứng với chuẩn $a(u, u)^{1/2}$ và tương đương với chuẩn ban đầu $|u|$. Khi đó, H vẫn là một không gian Hilbert với tích vô hướng này. Sử dụng biểu diễn Riesz-Fréchet ta sẽ biểu diễn φ theo tích vô hướng này, ta có sự tồn tại duy nhất $g \in H$ sao cho

$$\langle \varphi, v \rangle = a(g, v), \forall v \in H.$$

Ta cần tìm $u \in K$ sao cho

$$a(g - u, v - u) \leq 0, \forall v \in K.$$

Nghiệm của bài toán này đơn giản lại là phép chiếu g lên K theo tích vô hướng mới, nghĩa là phần tử $u \in K$ duy nhất thỏa mãn bài toán

$$\min_{v \in K} a(g - v, g - v)^{1/2}$$

hay u sẽ cực tiểu hoá

$$v \mapsto a(g - v, g - v) = a(v, v) - 2a(g, v) + a(g, g) = a(v, v) - 2\langle \varphi, v \rangle + a(g, g)$$

chính là

$$v \mapsto \frac{1}{2}a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle$$

□

Định lý 1.3. (Định lý Lax-Milgram) Cho không gian Hilbert H còn $a(u, v)$ là một dạng song tuyến tính liên tục bậc hai trên H . Khi đó, với $\varphi \in H^*$ bất kì, tồn tại duy nhất $u \in H$ thoả mãn

$$a(u, v) = \langle \varphi, v \rangle, \forall v \in H.$$

Hơn nữa, nếu a đối xứng, thì u được xác định bởi tính chất

$$u \in H \text{ và } \frac{1}{2}a(u, u) - \langle \varphi, u \rangle = \min_{v \in H} \left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle \right\}.$$

Chứng minh. Áp dụng định lý Stampacchia với $K = H$, ta có với $a(u, v)$ là một dạng song tuyến tính liên tục bậc hai trên không gian Hilbert H . Với mỗi $\varphi \in H^*$, tồn tại duy nhất $u \in K$ thoả mãn

$$a(u, v - u) \geq \langle \varphi, v - u \rangle, \forall v \in H$$

Hơn nữa, nếu a đối xứng thì u được xác định bởi

$$u \in H \text{ và } \frac{1}{2}a(u, u) - \langle \varphi, u \rangle = \min_{v \in H} \left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle \right\}.$$

Do $a(u, v - u) \geq \langle \varphi, v - u \rangle, \forall v \in H$ nên $\langle \varphi, v - u \rangle - a(u, v - u) \leq 0, \forall v \in H$ và do đó

$$\langle \varphi, tv - u \rangle - a(u, tv - u) \leq 0, \forall v \in H, \forall t \in \mathbb{R}$$

hay

$$t(\langle \varphi, v \rangle - a(u, v)) \leq \langle \varphi, u \rangle + a(u, u), \forall v \in H, \forall t \in \mathbb{R}. \quad (1.3)$$

Cố định v . Giả sử $\langle \varphi, v \rangle - a(u, v) \neq 0$.

- Nếu $\langle \varphi, v \rangle - a(u, v) > 0$. Do (1.3) đúng $\forall t \in \mathbb{R}$, ta có thể tùy ý chọn $t \rightarrow +\infty$, do đó $t(\langle \varphi, v \rangle - a(u, v)) \rightarrow +\infty$ hay $t(\langle \varphi, v \rangle - a(u, v))$ lớn tùy ý.

Mà $\langle \varphi, u \rangle + a(u, u) \in \mathbb{R}$ cố định do a, φ, u cố định (mâu thuẫn).

- Nếu $\langle \varphi, v \rangle - a(u, v) < 0$. Do (1.3) đúng $\forall t \in \mathbb{R}$, ta có thể tùy ý chọn $t \rightarrow -\infty$, do đó $t(\langle \varphi, v \rangle - a(u, v)) \rightarrow +\infty$ hay $t(\langle \varphi, v \rangle - a(u, v))$ lớn tùy ý.

Mà $\langle \varphi, u \rangle + a(u, u) \in \mathbb{R}$ cố định do a, φ, u cố định (mâu thuẫn).

Do đó $\langle \varphi, v \rangle - a(u, v) = 0$ với v đã chọn. Tuy nhiên, v đã được chọn tùy ý nên đẳng thức đúng với mọi v , hay

$$a(u, v) = \langle \varphi, v \rangle, \forall v \in H.$$

□

Từ đó ta rút ra nguyên lý sau:

Định lý 1.4. (Nguyên lý Dirichlet) Cho $f \in L^2(\Omega)$ bất kỳ, khi đó tồn tại duy nhất nghiệm yếu $u \in H_0^1(\Omega)$ của (1.1). Hơn nữa, u là nghiệm của bài toán

$$\min_{v \in H_0^1(\Omega)} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} (fv) dx \right\}$$

Chứng minh. Áp dụng định lý Lax-Milgram cho không gian Hilbert $H = H_0^1(\Omega)$ với dạng song tuyến tính

$$a(u, v) = \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx$$

và phiếm hàm tuyến tính liên tục f được xác định $\langle f, v \rangle = \int_{\Omega} (fv) dx$. □

Bước 3: Chỉ ra tính chính quy của nghiệm. Tính chính quy của nghiệm đã được chứng minh trong [7].

Bước 4: Xây dựng lại nghiệm mạnh. Giả sử nghiệm yếu $u \in H_0^1(\Omega)$ của (1.1) thuộc $C^2(\overline{\Omega})$. Khi đó $u = 0$ trên Γ . Mặt khác, ta có

$$\int_{\Omega} [-(\Delta u) v] dx = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in C_c^1(\Omega)$$

và do đó $-\Delta u = f$ hầu khắp nơi trên Ω . Lại có $u \in C^2(\Omega)$ nên $-\Delta u = f$ khắp nơi trên Ω . Vậy u là một nghiệm mạnh.

Ta xét thêm một số ví dụ. Với mỗi ví dụ, ta sẽ chỉ ra không gian hàm phù hợp để áp dụng định lý Lax-Milgram và thực hiện 4 bước trên.

1.2 Bài toán điều kiện biên Dirichlet không thuần nhất

Cho Ω là một miền trong \mathbb{R}^N và $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, ta cần tìm một hàm số $u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ thoả mãn phương trình tuyến tính

$$-\Delta u = f \quad \text{trong } \Omega. \quad (1.4)$$

Lấy $g \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$, ta xét điều kiện biên Dirichlet không thuần nhất

$$u = g \quad \text{trên } \partial\Omega. \quad (1.5)$$

Vì ánh xạ vết $\gamma: H^1(\Omega) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ là toàn ánh, nên tồn tại một hằng số đều C_γ và hàm $u_g \in H^1(\Omega)$ sao cho $\gamma(u_g) = g$ và $\|u_g\|_{H^1(\Omega)} \leq C_\gamma \|g\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}$. Khi đó $u_0 := u - u_g$ thoả mãn $\gamma(u_0) = g - g = 0$, nghĩa là $u_0 \in H_0^1(\Omega)$.

Điều này dẫn đến bài toán yếu sau

$$\begin{cases} \text{Tìm } u \in H^1(\Omega) \text{ sao cho } u_0 := u - u_g \in V := H_0^1(\Omega) \text{ thoả mãn} \\ a(u_0, w) = \int_\Omega f w dx - a(u_g, w), \quad \forall w \in V. \end{cases} \quad (1.6)$$

Vế phải trong (1.6) xác định một dạng tuyến tính liên tục trên V do tính bị chặn của dạng song tuyến a trên $H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)$ và của phần tử u_g trên $H^1(\Omega)$. Ta tiếp tục làm như trường hợp điều kiện biên thuần nhất và chứng minh được kết quả sau:

Mệnh đề 1.5. Cho $f \in L^2(\Omega)$ and $g \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$. Khi đó

- Nếu $u \in H^1(\Omega)$ là nghiệm của (1.6) thì nó thoả mãn phương trình (1.4) hầu khắp nơi trong Ω và điều kiện biên (1.5) hầu khắp nơi trên $\partial\Omega$.
- Bài toán (1.6) đặt chính.

1.3 Bài toán điều kiện biên Neumann thuần nhất

Cho $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ là một miền bị chặn của lớp C^1 . Ta tìm hàm số $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ thoả mãn

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{trong } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{trên } \Gamma, \end{cases} \quad (1.7)$$

với f là hàm cho trước trên Ω , $\frac{\partial u}{\partial n}$ kí hiệu đạo hàm theo vector pháp tuyến hướng ngoài của u , nghĩa là $\frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot \mathbf{n}$, với \mathbf{n} là vector pháp tuyến hướng ngoài đơn vị của Γ .

Trước hết, khác với bài toán Dirichlet, để (1.7) có nghiệm thì ta phải đặt thêm điều kiện tương thích (compability condition) lên dữ liệu f là

$$\int_{\Omega} f dx = 0. \quad (1.8)$$

Thật vậy, nếu u là nghiệm của (1.7) thì

$$\int_{\Omega} f dx = \int_{\Omega} -\nabla^2 u dx = \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla 1) dx - \int_{\Gamma} (\nabla u \cdot \mathbf{n}) ds = 0.$$

Trong trường hợp này, ta không thể thiết lập bài toán yếu trong không gian $H = H^1(\Omega)$ vì không chứng minh được dạng song tuyến $a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx$ thoả mãn điều kiện bức trong không gian này, và do đó bài toán

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx$$

không đặt chỉnh.

Đồng thời, ta thấy rằng khi phương trình có nghiệm thì đó cũng không phải là nghiệm duy nhất, vì nếu u là nghiệm thì $u + c$ cũng là nghiệm với mọi hằng số c . Một cách đơn giản để khắc phục hạn chế này là giới hạn nghiệm trong không gian các hàm có trung bình bằng 0 trên Ω , tức là chọn không gian tìm kiếm $H_*^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} v dx = 0\}$. Như vậy, bài toán yếu có dạng như sau

Định nghĩa 1.6. Một nghiệm yếu của (1.7) là một hàm số $u \in H_*^1(\Omega)$ thoả mãn

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in H_*^1(\Omega)$$

Bước 1 chứng minh mỗi nghiệm mạnh là một nghiệm yếu. Theo công thức Green, ta có

$$\int_{\Omega} [(\Delta u)v] dx = \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} v ds - \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx \quad \forall u \in C^2(\bar{\Omega}), \quad \forall v \in C^1(\bar{\Omega}), \quad (1.9)$$

với $d\sigma$ là độ đo của Γ . Nếu u là nghiệm mạnh của (1.7) thì $u \in H_*^1(\Omega)$ và ta có

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in C_*^1(\bar{\Omega})$$

Bởi tính trừ mật, ta có

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v) dx = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in H_*^1(\Omega).$$

Bước 2 chứng minh sự tồn tại và duy nhất của nghiệm yếu.

Mệnh đề 1.7. Với mỗi $f \in L^2(\Omega)$, tồn tại duy nhất nghiệm yếu $u \in H_*^1(\Omega)$ của (1.7). Hơn nữa, u là nghiệm của bài toán sau

$$\min_{v \in H_*^1(\Omega)} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} (fv) dx \right\}.$$

Chứng minh. Áp dụng định lý Lax-Milgram với $H = H_*^1(\Omega)$, để ý rằng từ bất đẳng thức Poincare-Steklov, ta chứng minh được không gian này với chuẩn $\|v\|_H := \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)^2}$ là không gian Hilbert. \square

Bước 3 chỉ ra tính chính quy của nghiệm. Tính chính quy của nghiệm đã được chứng minh trong [7].

Bước 4 hồi phục lại nghiệm mạnh.

Nếu $u \in C^2(\Omega)$ là một nghiệm yếu của (1.7), từ (1.9) ta có

$$\int_{\Omega} (-\Delta uv) dx + \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} v ds = \int_{\Omega} (fv) dx \quad \forall v \in C^1(\bar{\Omega}). \quad (1.10)$$

Ở đây, ta chọn $v \in C_*^1(\Omega)$ để suy ra

$$-\Delta u = f \text{ trong } \Omega$$

Và với $v \in C^1(\bar{\Omega})$, ta có

$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} v ds = 0 \quad \forall v \in C^1(\bar{\Omega})$$

và do đó $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ trên Γ .

Chương 2

Phương pháp giải

2.1 Phương pháp Ritz cổ điển

Việc giải các bài toán tìm cực tiểu trong các kết quả nêu trong phần trên đều được đưa về từ Định lý Lax-Milgram: tìm u thỏa mãn

$$a(u, v) = \langle \varphi, v \rangle, \forall v \in H \quad (2.1)$$

hay

$$\min_{v \in H} \left\{ \frac{1}{2} a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle \right\}.$$

Bài toán này có thể được đưa về việc xấp xỉ bằng phương pháp số. Các không gian hàm H đã xét có hệ cơ sở trực chuẩn đếm được. Khi đó, có các không gian con hữu hạn chiều $H_1, H_2, \dots \subset H$ với $\dim H_k = k$, có tính chất sau: với mỗi $u \in H$ và mỗi $\epsilon > 0$, tồn tại một số $K \in \mathbb{N}$ và $u_k \in H_k$ với

$$\|u - u_k\|_H \leq \epsilon \quad \forall k \geq K. \quad (2.2)$$

Xấp xỉ Ritz của các nghiệm yếu trong các bài toán biên phân đã nêu được định nghĩa là $u_k \in H_k$ thỏa mãn

$$a(u_k, v_k) = \langle \varphi, v_k \rangle, \forall v_k \in H_k. \quad (2.3)$$

Định lí 2.1. *Tồn tại duy nhất nghiệm của (2.3)*

Chứng minh. Do các không gian con hữu hạn chiều của không gian Hilbert cũng là các không gian Hilbert, ta có thể áp dụng định lý Lax-Milgram cho các không gian này. \square

Định lí 2.2. *Nghiệm của (2.3) là xấp xỉ tốt nhất của u trong H_k , nghĩa là*

$$\|u - u_k\|_H = \inf_{v_k \in H_k} \|u - v_k\|_H. \quad (2.4)$$

Chứng minh. Vì $H_k \subset H$, ta có thể sử dụng hàm thử từ H_k trong phương trình (2.1). Khi đó, hiệu của (2.1) và (2.3) là

$$a(u - u_k, v_k) = 0 \quad \forall v_k \in H_k. \quad (2.5)$$

Do đó, $u - u_k$ là trực giao với không gian H_k : $u - u_k \perp H_k$. Có nghĩa là u_k là hình chiếu trực giao của u trên H_k ứng với tích vô hướng trong H .

Với w_k bất kì trong H_k , từ (2.5) và bất đẳng thức Cauchy-Schwartz, ta có

$$\begin{aligned} \|u - u_k\|_H^2 &= a(u - u_k, u - u_k) \\ &= a(u - u_k, u - \underbrace{(u_k - w_k)}_{v_k}) = a(u - u_k, u - v_k) \\ &\leq \|u - u_k\|_H \|u - v_k\|_H. \end{aligned}$$

Do $w_k \in H_k$ là tùy ý nên $v_k \in H_k$ cũng là tùy ý. Nếu $\|u - u_k\|_H > 0$, chia 2 vế cho $\|u - u_k\|_H$, ta sẽ được điều phải chứng minh. Còn nếu $\|u - u_k\|_H = 0$, định lí hiển nhiên đúng. \square

Định lí 2.3. *(Sự hội tụ của xấp xỉ Ritz) Xấp xỉ Ritz hội tụ về nghiệm yếu của bài toán biến phân*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u - u_k\|_H = 0.$$

Chứng minh. Từ tính chất xấp xỉ tốt nhất (2.4) và tính chất (2.2), ta có

$$\|u - u_k\|_H = \inf_{v_k \in H_k} \|u - v_k\|_H \leq \varepsilon$$

với mỗi $\varepsilon > 0$ và $k \geq K(\varepsilon)$. Từ đó, sự hội tụ được chứng minh. \square

Ta có thể sử dụng hệ cơ sở $\{\phi_i\}_{i=1}^k$ bất kỳ của H_k cho biểu diễn của u_k . Đầu tiên, phương trình Ritz (2.3) thoả mãn với mọi $v_k \in H_k$ khi và chỉ khi nó thoả mãn mỗi hàm cơ sở ϕ_i . Điều này có được từ tính tuyến tính của 2 vế với các hàm thử và mỗi hàm $v_k \in H_k$ đều là tổ hợp tuyến tính của các hàm cơ sở. Đặt $v_k = \sum_{i=1}^k \alpha_i \phi_i$, từ (2.3) ta có

$$a(u_k, v_k) = \sum_{i=1}^k \alpha_i a(u_k, \phi_i) = \sum_{i=1}^k \alpha_i \langle \varphi, \phi_i \rangle = \langle \varphi, v_k \rangle.$$

Đẳng thức này xảy ra khi nếu $a(u_k, \phi_i) = \langle \varphi, \phi_i \rangle, i = 1, \dots, k$. Mặt khác, nếu (2.3) đúng thì nó đúng với mỗi hàm cơ sở ϕ_i . Khi đó, ta có thể xây dựng nghiệm xấp xỉ là tổ hợp tuyến tính của các hàm cơ sở

$$u_k = \sum_{j=1}^k u^j \phi_j$$

với các hệ số $u^j \in \mathbb{R}$ chưa biết. Khi đó

$$\sum_{j=1}^k a(u^j \phi_j, \phi_i) = \sum_{j=1}^k a(\phi_j, \phi_i) u^j = \langle \varphi, \phi_i \rangle, \quad i = 1, \dots, k.$$

Phương trình này là hệ phương trình tuyến tính có dạng $Au = \varphi$, với

$$A = (a_{ij})_{i,j=1}^k = a(\phi_j, \phi_i)_{i,j=1}^k$$

và vế phải là một vector φ có độ dài k với $\varphi_i = \langle \varphi, \phi_i \rangle, i = 1, \dots, k$.

Từ đây ta có thể thấy được vấn đề quan trọng nhất của phương pháp Ritz là cách chọn một hệ cơ sở thích hợp $\{\phi_i\}_{i=1}^k$ không gian V_k .

2.2 Phương pháp Ritz sử dụng học sâu (deep learning)

2.2.1. Tổng quan về Deep Learning

Deep learning là một lĩnh vực quan trọng trong trí tuệ nhân tạo, nổi bật với khả năng xử lý dữ liệu phức tạp và giải quyết các bài toán khó khăn trong nhiều lĩnh vực ứng dụng. Được xây dựng trên cơ sở của mạng nơ-ron nhân tạo, deep learning đã đạt được những thành tựu ấn tượng trong việc xử lý ảnh, nhận dạng giọng nói, dịch máy, và nhiều ứng dụng khác.

Mạng nơ-ron nhân tạo (neural network) là một mô hình tính toán được lấy cảm hứng từ cấu trúc và hoạt động của hệ thần kinh sinh học. Nó bao gồm một tập hợp các nơ-ron nhân tạo được tổ chức thành các lớp kết nối. Mỗi nơ-ron nhận đầu vào từ các nơ-ron ở lớp trước đó, thực hiện một phép tính và chuyển tiếp kết quả đến các nơ-ron ở lớp tiếp theo. Quá trình này được thực hiện qua các trọng số và hàm kích hoạt để tạo ra một dự đoán hoặc đầu ra cuối cùng.

Học sâu (deep learning) là một dạng đặc biệt của mạng nơ-ron nhân tạo, trong đó mô hình được xây dựng với nhiều lớp ẩn (hidden layers) sâu hơn. Mỗi lớp ẩn bao gồm nhiều nơ-ron và có khả năng học biểu diễn các đặc trưng phức tạp từ dữ liệu đầu vào. Các lớp ẩn nâng cao độ phức tạp và khả năng biểu diễn của mô hình, cho phép học sâu xử lý các bài toán có tính phức tạp cao.

Trong học sâu, việc học và điều chỉnh các trọng số của mô hình được thực hiện thông qua một quá trình gọi là lan truyền ngược (backpropagation). Quá trình này dựa trên việc tính toán sai lệch giữa đầu ra dự đoán và đầu ra thực tế, sau đó cập nhật các trọng số theo chiều ngược lại từ lớp cuối cùng đến lớp đầu tiên. Quá trình lan truyền ngược này cho phép mô hình tự động học các

đặc trưng phức tạp từ dữ liệu huấn luyện.

Để xây dựng một mạng nơ-ron nhân tạo đơn giản, chúng ta có thể sử dụng các công thức cơ bản như sau: Đầu tiên, ta cần tính toán tổng trọng số đầu vào cho mỗi nơ-ron:

$$\text{Tổng đầu vào của nơ-ron } j = \sum_{i=1}^n \theta_{ij} \cdot x_i + b_j$$

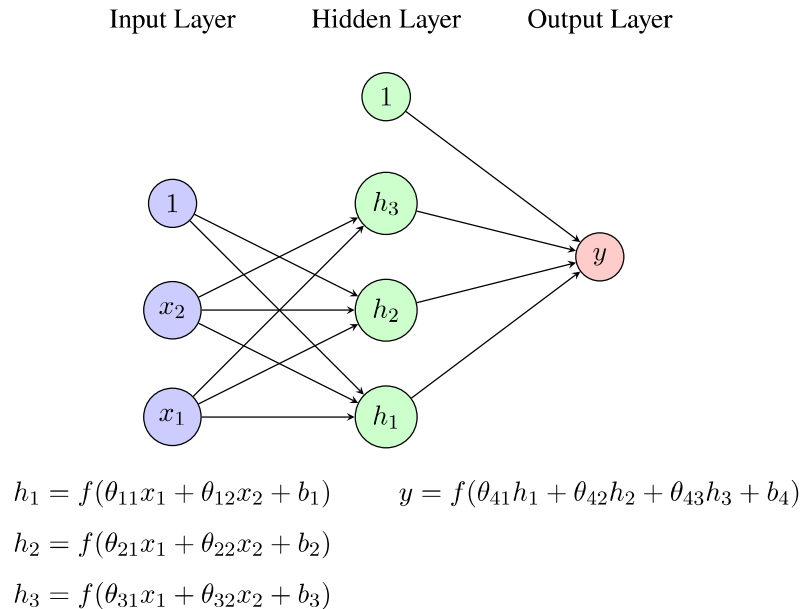
Trong đó θ_{ij} là trọng số liên kết giữa nơ-ron i và j , x_i là đầu vào của nơ-ron i , b_j là độ lệch (bias) của nơ-ron j , và n là số lượng nơ-ron ở lớp trước đó. Sau đó, ta áp dụng một hàm kích hoạt phi tuyến để tạo ra đầu ra của nơ-ron:

$$a_j = f(\text{Tổng đầu vào của nơ-ron } j)$$

Hàm kích hoạt f có thể là hàm sigmoid, hàm tanh, hoặc hàm ReLU (Rectified Linear Unit) và có vai trò làm cho mô hình của chúng ta có tính phi tuyến [10]. Quá trình này được lặp lại cho tất cả các nơ-ron trong mạng cho đến khi đạt được đầu ra cuối cùng.

Sơ đồ sau là một mô hình trực quan biểu diễn quá trình tính toán (quá trình feedforward) của một mạng nơ-ron kết nối toàn phần (fully connected - FC). Các mạng nơ-ron nói chung đều có một lớp đầu vào (input layer) và một lớp đầu ra (output layer). Các lớp này lần lượt tương ứng với x, y trong kí hiệu hàm số $y = u(x)$ nên mạng nơ-ron có thể hiểu là một hàm số. Số chiều của x và y chính là số nút (node) của lớp đầu vào và lớp đầu ra. Ở giữa lớp đầu vào và lớp đầu ra là các lớp ẩn (hidden layer). Số lượng lớp ẩn cũng như số lượng nút trong mỗi lớp ẩn phản ánh độ phức tạp của mạng nơ-ron. Càng nhiều lớp hay nút mỗi lớp thì mạng nơ-ron càng phức tạp.

Công việc "huấn luyện" (training) một mạng nơ-ron nói riêng hay một mô



Hình 2.1: Cấu trúc mạng nơ-ron đơn giản.

hình học máy nói chung là tìm ra các tham số cần thiết. Như trong sơ đồ trên, các hệ số θ là các hệ số cần được "học" qua dữ liệu. Nhìn chung, quá trình "học" này sẽ như sau:

- Đầu tiên, ta có một bộ dữ liệu dạng (x, y) , số lượng điểm dữ liệu phụ thuộc vào quy mô bài toán, khả năng thu thập. Bên cạnh đó, ta khởi tạo các giá trị ban đầu của các tham số θ . Các giá trị này có thể khởi tạo ngẫu nhiên hoặc tùy ý, tùy thuộc vào bài toán cũng như mô hình.
- Tiếp theo, ta tính toán các giá trị \tilde{y} qua quá trình feedforward với các x của bộ dữ liệu và hệ số θ đã khởi tạo. Các giá trị \tilde{y} này là các giá trị mà mô hình hiện tại (với các tham số hiện tại) dự đoán.
- Sau đó, ta sẽ tính một hàm mất mát (loss function) $J(\theta)$. Hàm số này là hàm số theo biến θ và nó thể hiện sự sai khác giữa các y và \tilde{y} theo một

tiêu chuẩn nào. Sai khác càng nhỏ, việc dự đoán càng chính xác. $J(\theta)$ sẽ khác nhau tùy vào bài toán.

- Sử dụng các thuật toán tối ưu để tối thiểu hoá hàm mất mát, thường là các thuật toán lặp, điều chỉnh θ để giá trị của hàm mất mát ngày càng nhỏ. Một loại thuật toán cơ bản và phổ biến là thuật toán gradient descent sẽ được trình bày ở phần sau.

2.2.2. Phương pháp Ritz sử dụng học sâu

Người ta đã chứng minh được rằng, với một hàm số liên tục bất kỳ $f(x)$ và một số $\varepsilon > 0$, luôn tồn tại một mạng nơ-ron đủ lớn (với số lượng hidden layers, nodes đủ lớn và hàm kích hoạt phù hợp) và đầu ra dạng $g(x)$ sao cho với mọi x , ta có $\|f(x) - g(x)\| < \varepsilon$ [11]. Nói cách khác, mạng nơ-ron có thể sử dụng để xấp xỉ các hàm liên tục. Ý tưởng của phương pháp Ritz sử dụng học sâu là sử dụng mạng nơ-ron như một nghiệm yếu của bài toán biến phân, với hàm mất mát được xây dựng qua bài toán yếu Định lý Lax-Milgram:

$$\min_{v \in H} \left\{ \frac{1}{2} a(v, v) - \langle \varphi, v \rangle \right\}$$

Ví dụ, việc giải bài toán (1.1) đã được đưa về việc tìm u thoả mãn

$$\min_{v \in H_0^1(\Omega)} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} (fv) dx \right\}$$

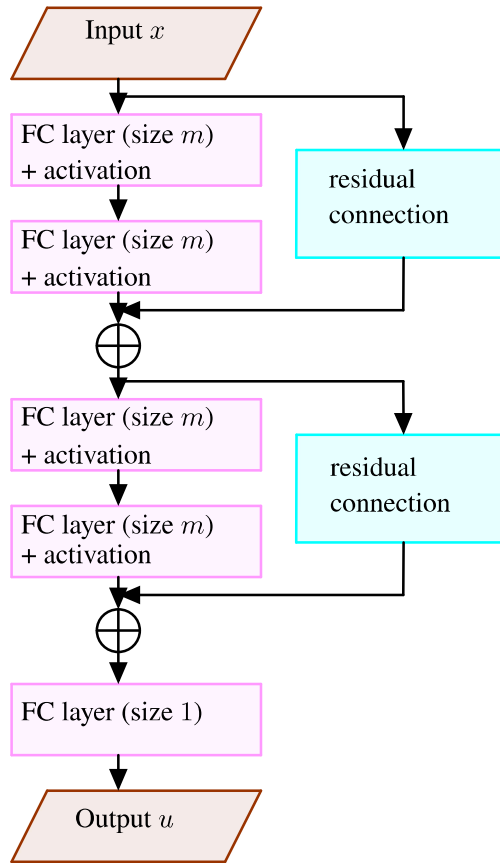
Đến đây, thay vì sử dụng phương pháp Ritz truyền thống (xấp xỉ u bằng một hệ cơ sở hữu hạn), ta sẽ xấp xỉ u là một mạng nơ-ron. Để có được sự xấp xỉ này, sau khi xây dựng cấu trúc mạng nơ-ron, ta cần quan tâm đến cách tính các tích phân trong bài toán một cách rời rạc và các thuật toán tối ưu để tìm

cực tiểu. Trong luận văn này, ta sử dụng phương pháp Monte Carlo để tính xấp xỉ tích phân và phương pháp Adam để cực tiểu hoá hàm mục tiêu.

Trong cấu trúc của mạng nơ-ron của phương pháp này, mỗi layer của mạng được xây dựng bởi nhóm nhiều khối, mỗi khối bao gồm hai biến đổi tuyến tính, hai hàm kích hoạt và một residual connection, đồng thời cả đầu vào s và đầu ra t của khối là các vectors trong \mathbb{R}^m . Khối thứ i có thể biểu diễn dưới dạng

$$t = f_i(s) = \phi \left(W_{i,2} \cdot \phi (W_{i,1}s + b_{i,1}) + b_{i,2} \right) + s,$$

với $W_{i,1}, W_{i,2} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $b_{i,1}, b_{i,2} \in \mathbb{R}^m$ là các tham số tương ứng với khối, ϕ là hàm kích hoạt. Sự xuất hiện của residual connection là để giúp tránh việc triệt tiêu gradient [12].



Hình 2.2: Cấu trúc mạng nơ-ron được sử dụng trong phương pháp Ritz với 2 khối

2.2.3. Thuật toán Monte Carlo trong xấp xỉ tích phân

Thuật toán Monte Carlo là một phương pháp xấp xỉ dựa trên việc sử dụng mẫu ngẫu nhiên. Một trong những ứng dụng quan trọng của nó là xấp xỉ giá trị của tích phân hàm nhiều biến, đặc biệt khi không gian chiều cao hoặc miền tích phân phức tạp.

Phương pháp Monte Carlo để xấp xỉ tích phân hàm $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ trên một miền $D \subseteq \mathbb{R}^n$ hoạt động như sau:

1. Lấy một tập mẫu ngẫu nhiên $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ trên miền D .
2. Tính giá trị trung bình của hàm trên tập mẫu này: $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$.
3. Nhân giá trị trung bình với khối lượng (hoặc diện tích, thể tích,... tùy thuộc vào chiều của D) của miền D để thu được xấp xỉ tích phân.

Chương 3

Một số ví dụ

3.1 Ví dụ 1

Xét bài toán:

$$\begin{cases} -\Delta u = 1 & \text{trong } \Omega, \\ u = 0 & \text{trên } \partial\Omega. \end{cases}$$

ở đây $\Omega = \{(x, y) \mid x^2 + y^2 < 1\}$. Nghiệm chính xác của bài toán này là

$$u = -\frac{1}{4}(x^2 + y^2 - 1).$$

Đây là dạng bài toán (1.1) với $f = 1$. Và theo Nguyên lí Dirichlet, nghiệm yếu $u \in H_0^1(\Omega)$ là nghiệm của bài toán

$$\min_{v \in H_0^1(\Omega)} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} v dx \right\}.$$

Ta sẽ sử dụng mạng nơ-ron để một nghiệm yếu của bài toán, hay tìm xấp xỉ của nghiệm yếu trong lớp các mạng nơ-ron, việc giải bài toán đồng nghĩa với việc huấn luyện mạng nơ-ron này. Hàm mất mát chính là hàm mục tiêu của bài toán tối ưu được nêu ở trên. Tuy nhiên, việc huấn luyện mạng nơ-ron nhìn chung không thể giới hạn $v \in H_0^1(\Omega)$ hay $v = 0$ trên $\partial\Omega$. Do đó, ta cần

thêm một số hạng phạt vào hàm mất mát dưới dạng chuẩn L^2 . Tóm lại, hàm mất mát cuối cùng sẽ như sau

$$J(\theta) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla v|^2 - v \right) dx + \beta \int_{\partial\Omega} v^2 ds.$$

Khi β đủ lớn thì $v|_{\partial\Omega}$ rất nhỏ để xấp xỉ điều kiện biên.

Mô hình được sử dụng để giải bài toán này có cấu trúc là một mạng nơ-ron có residual connection như đã đề cập ở phần 1.3.2 với số khối từ 1 đến 5, $m = 10$, đào tạo qua 2000 bước lặp, trọng số β của số hạng phạt là 200, hàm kích hoạt được sử dụng là $\phi(x) = \max\{x, 0\}$ (hàm ReLU) và $\phi(x) = \max\{x^3, 0\}$. Để đánh giá mô hình, ta sử dụng sai số theo chuẩn L_2 được tính bởi công thức

$$\sqrt{\frac{\int_{\Omega} (v^* - v)^2}{\int_{\Omega} v^2}}$$

với v^* là mạng nơ-ron, v là nghiệm chính xác của bài toán. Phương pháp Adam được sử dụng với $\alpha = 0.01$, $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$.

Kết quả của từng mô hình được ghi lại trong các bảng sau:

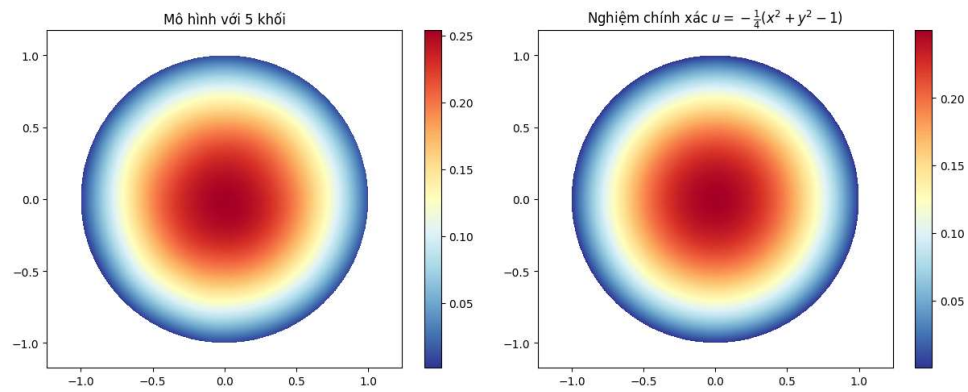
Bảng 3.1: Sai số của phương pháp Ritz sâu cho ví dụ 1, với hàm kích hoạt là $\phi(x) = \max\{x, 0\}$

Số khối	Số tham số	Sai số theo chuẩn L_2
1	261	0.1509
2	481	0.1254
3	701	0.1365
4	921	0.1696
5	1141	0.1379
6	1361	0.1494

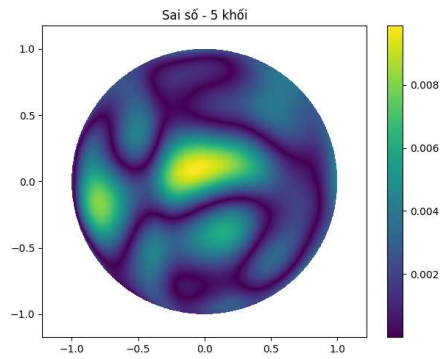
Sau đây là hình vẽ của kết quả của mô hình có sai số nhỏ nhất và nghiệm chính xác, cùng với sai số của nghiệm đó với nghiệm chính xác.

Bảng 3.2: Sai số của phương pháp Ritz sâu cho ví dụ 1, hàm kích hoạt $\phi(x) = \max\{x^3, 0\}$

Số khối	Số tham số	Sai số theo chuẩn L_2
1	261	0.0270
2	481	0.0277
3	701	0.0279
4	921	0.0276
5	1141	0.0230
6	1361	0.0232

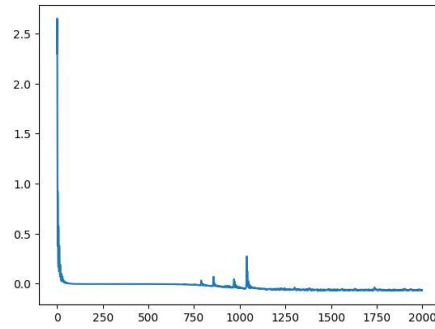


Hình 3.1: So sánh kết quả của mạng nơ-ron (trái) và nghiệm chính xác (phải) trong ví dụ 1.



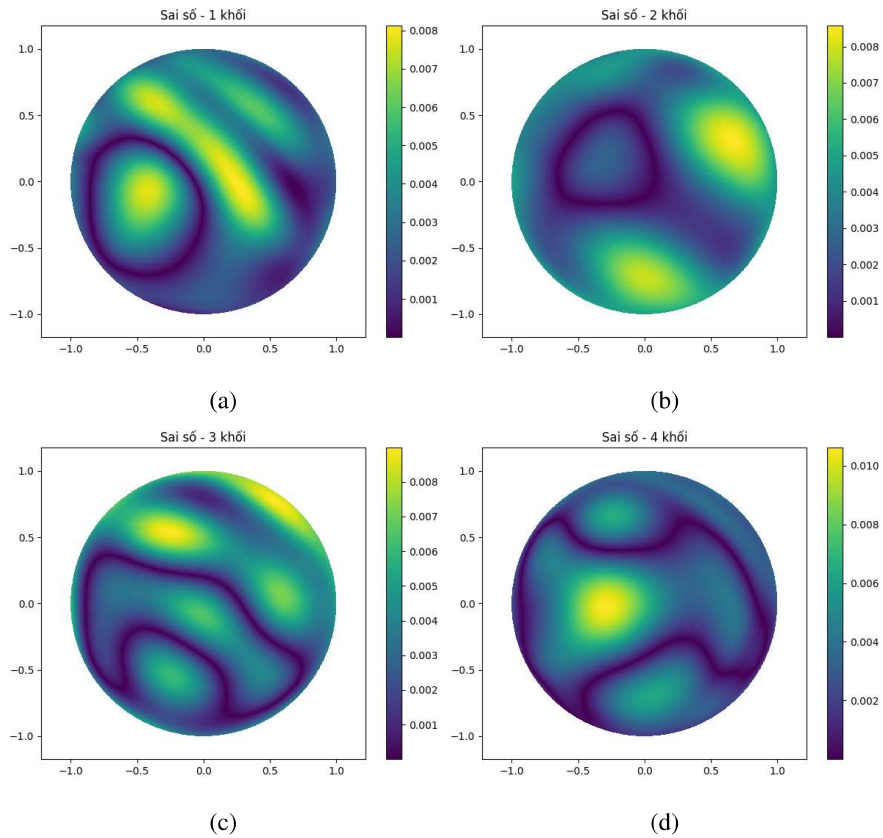
Hình 3.2: Sai số của mô hình với 5 khối so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.

Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron này trong quá trình huấn luyện được biểu diễn trong hình sau.

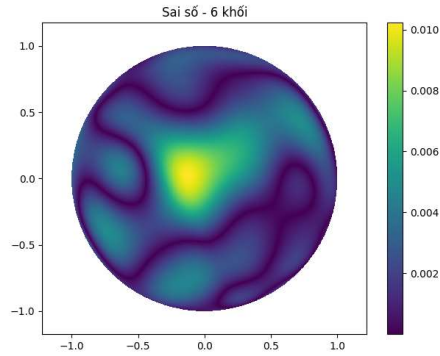


Hình 3.3: Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron 5 khối trong ví dụ 1.

Sau đây là các hình vẽ thể hiện sai số của các mô hình sử dụng hàm kích hoạt $\phi(x) = \max\{x^3, 0\}$ còn lại.



Hình 3.4: Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.



(a)

Hình 3.5: Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 1.

3.2 Ví dụ 2

Xét bài toán:

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{trong } \Omega, \\ u = xy & \text{trên } \partial\Omega. \end{cases}$$

ở đây $\Omega = \{(x, y) \mid 0 < x, y < 1\}$. Nghiệm chính xác của bài toán này là

$$u = xy$$

Đây là dạng bài toán (1.6) với $f = 0, g = xy$.

Tương tự như ví dụ trên, ta cần thêm một số hạng phạt vào hàm mất mát để đảm bảo điều kiện biên của bài toán. Số hạng này là tổng quát hoá của ví dụ 1, thay vì $\beta \int_{\partial\Omega} v^2$, thì sẽ là $\beta \int_{\partial\Omega} (v - g)^2$. Cụ thể, hàm mất mát cuối cùng sẽ như sau:

$$J(\theta) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla v|^2 \right) dx + \beta \int_{\partial\Omega} (v - xy)^2 ds$$

Cấu trúc mạng nơ-ron, trọng số, hàm kích hoạt, số bước lặp, công thức sai số ở ví dụ này được giữ nguyên so với ví dụ 1. Phương pháp Adam được sử

dụng với $\alpha = 0.001, \beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.999$. Kết quả của từng mô hình được ghi lại trong bảng sau:

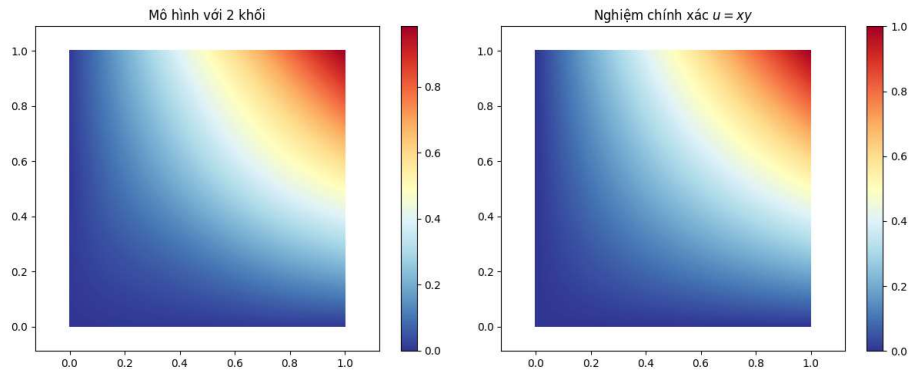
Bảng 3.3: Sai số của phương pháp Ritz sâu cho ví dụ 2, với hàm kích hoạt là $\phi(x) = \max\{x, 0\}$

Số khối	Số tham số	Sai số theo chuẩn L_2
1	261	0.1875
2	481	0.1833
3	701	0.2563
4	921	0.1901
5	1141	0.2642
6	1361	0.2592

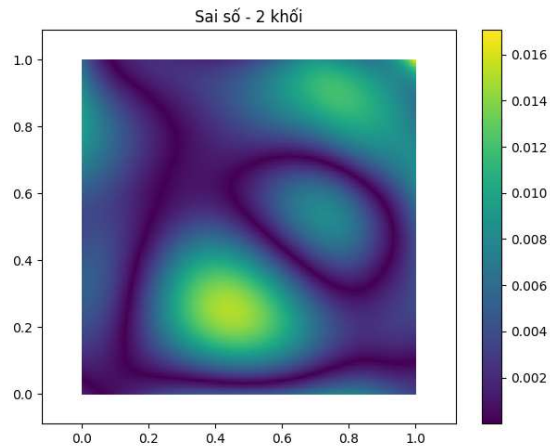
Bảng 3.4: Sai số của phương pháp Ritz sâu cho ví dụ 2, với hàm kích hoạt là $\phi(x) = \max\{x^3, 0\}$

Số khối	Số tham số	Sai số theo chuẩn L_2
1	261	0.0292
2	481	0.0174
3	701	0.0556
4	921	0.0218
5	1141	0.0360
6	1361	0.0344

Sau đây là hình vẽ của kết quả của mô hình có sai số nhỏ nhất và nghiệm chính xác, cùng với sai số của nghiệm đó với nghiệm chính xác.

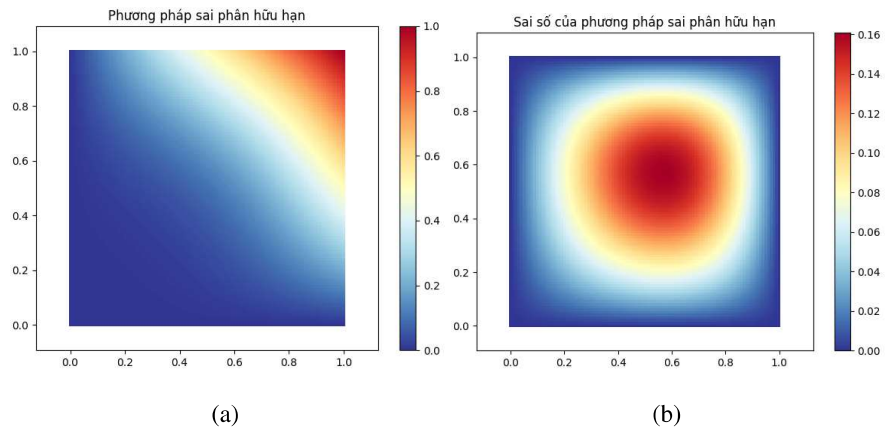


Hình 3.6: So sánh kết quả của mạng nơ-ron (trái) và nghiệm chính xác (phải) trong ví dụ 2.



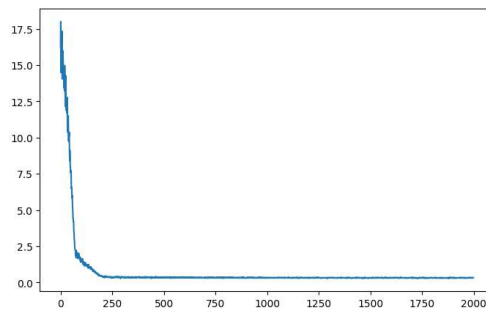
Hình 3.7: Sai số của mô hình với 2 khối so với nghiệm chính xác trong ví dụ 2.

Ở ví dụ này, phương pháp sai phân hữu hạn [13] đã được sử dụng để so sánh với phương pháp Ritz sâu. Dưới đây là hình biểu diễn nghiệm xấp xỉ của phương pháp này, cùng với sai số so với nghiệm chính xác, với $\Delta x = \Delta y = 0.01$.



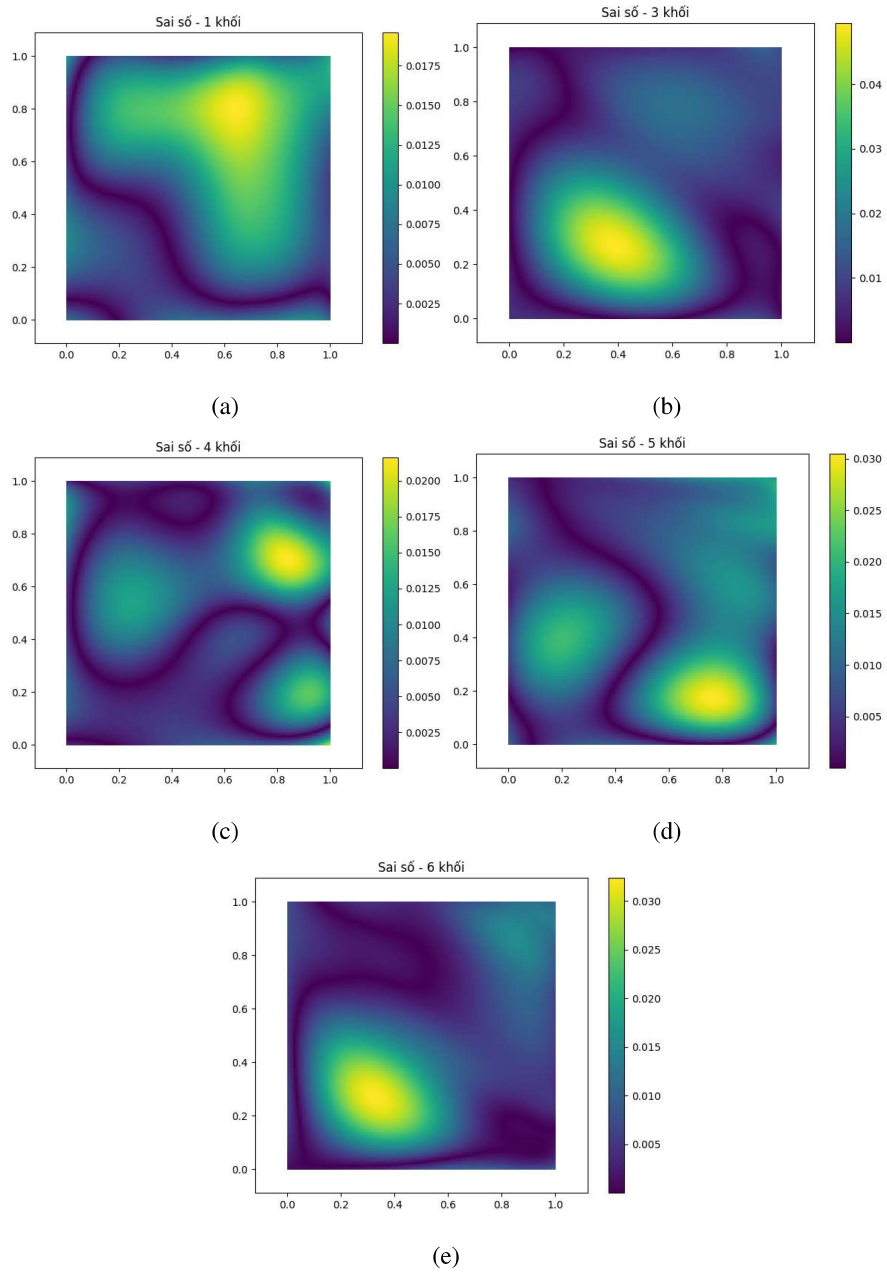
Hình 3.8: Phương pháp sai phân hữu hạn và sai số trong ví dụ 2.

Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron này trong quá trình huấn luyện được biểu diễn trong hình sau.



Hình 3.9: Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron 2 khối trong ví dụ 2.

Sau đây là các hình vẽ thể hiện sai số của các mô hình sử dụng hàm kích hoạt $\phi(x) = \max\{x^3, 0\}$ còn lại.



Hình 3.10: Sai số của các mô hình so với nghiệm chính xác trong ví dụ 2.

3.3 Ví dụ 3

Ví dụ tiếp theo là một bài toán trên một miền bị cắt:

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = 1, & x \in \Omega, \\ u(x) = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases}$$

ở đây $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1) \setminus [0, 1) \times \{0\}$. Đây là dạng bài toán (1.1) với $f = 1$. Theo Nguyên lí Dirichlet, nghiệm yếu $u \in H_0^1(\Omega)$ là nghiệm tối ưu của bài toán

$$\min_{v \in H_0^1(\Omega)} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} v dx \right\}.$$

Tương tự các ví dụ trên, ta cần thêm một số hạng phạt vào hàm mất mát để đảm bảo điều kiện biên của bài toán. Số hạng này sẽ giống ví dụ 1, và hàm mất mát sẽ trở thành

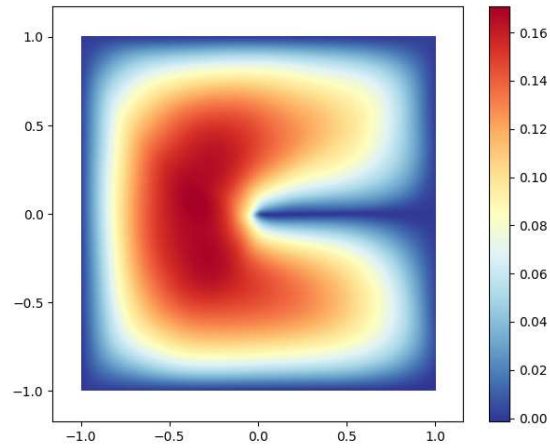
$$J(\theta) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla v|^2 - v \right) dx + \beta \int_{\partial\Omega} v^2 ds.$$

Cấu trúc mạng nơ-ron so với các ví dụ trên. Trọng số β được thay đổi từ 200 thành 500, số bước lặp được tăng lên 50000, còn hàm kích hoạt là $\phi(x) = \tanh x$. Phương pháp Adam được sử dụng với $\alpha = 3 \times 10^{-3}$, $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$.

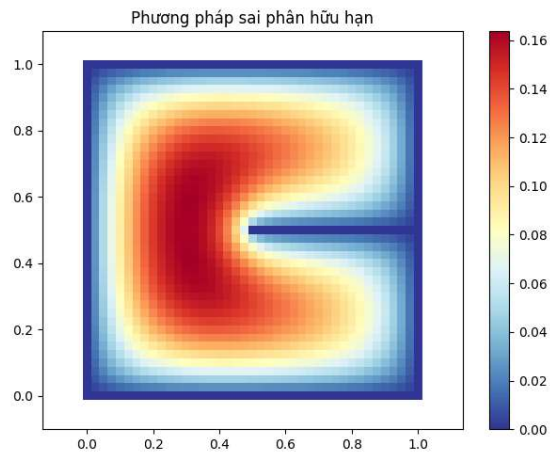
Hình vẽ sau biểu diễn nghiệm thu được:

Phương pháp sai phân hữu hạn [13] cũng được sử dụng để giải ví dụ này và nó cho nghiệm xấp xỉ như sau:

Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron này trong quá trình huấn luyện

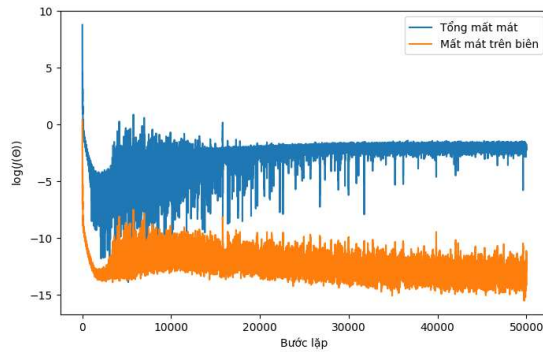


Hình 3.11: Kết quả của mạng nơ-ron trong ví dụ 3.



Hình 3.12: Phương pháp sai phân hữu hạn trong ví dụ 3.

được biểu diễn trong hình sau:



Hình 3.13: Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron trong ví dụ 3.

3.4 Ví dụ 4

Các phương pháp sử dụng học sâu thể hiện khá tốt trong các bài toán nhiều chiều. Ví dụ tiếp theo là một ví dụ trong \mathbb{R}^{10} :

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = 0 & \text{trong } \Omega, \\ u(x) = \sum_{k=1}^5 x_{2k-1}x_{2k} & \text{trên } \partial\Omega, \end{cases}$$

ở đây $\Omega = (0, 1)^{10}$. Nghiệm chính xác của bài toán này là

$$u(x) = \sum_{k=1}^5 x_{2k-1}x_{2k}$$

Đây là dạng bài toán (1.6) với $f = 0, g = \sum_{k=1}^5 x_{2k-1}x_{2k}$. Tương tự như ví dụ 2, ta cần thêm một số hạng phạt vào để đảm bảo điều kiện biên của bài toán. Hàm mất mát trở thành

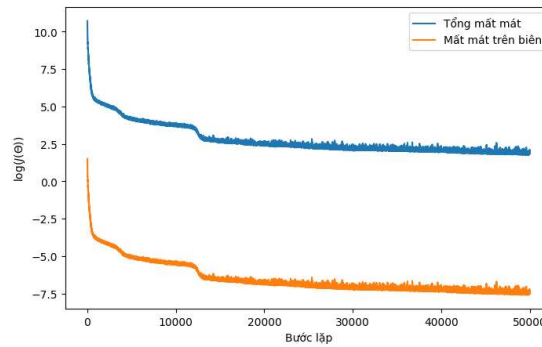
$$J(\theta) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla v|^2 \right) dx + \beta \int_{\partial\Omega} \left(v - \sum_{k=1}^5 x_{2k-1}x_{2k} \right)^2 ds.$$

Cấu trúc mạng nơ-ron, trọng số, số bước lặp, công thức sai số ở ví dụ này được giữ nguyên so với ví dụ 3. Hàm kích hoạt trong ví dụ này là $\phi(x) = \max\{0, x\}$ (hàm ReLU). Phương pháp Adam được sử dụng với $\alpha = 10^{-3}, \beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.999$.

Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron trong quá trình huấn luyện được biểu diễn trong hình sau:

Bảng 3.5: Sai số của phương pháp Ritz sâu cho ví dụ 4

Số khối	Số tham số	Sai số theo chuẩn L_2
1	341	0.0582
2	561	0.0399
3	781	0.0130
4	1001	0.0161
5	1221	0.0131
6	1441	0.0158



Hình 3.14: Giá trị của hàm mất mát của mạng nơ-ron trong ví dụ 4.

3.5 Nhận xét kết quả của ví dụ

Qua các ví dụ trên, ta rút ra một số nhận xét như sau:

- Một cách tổng quát, phương pháp Ritz sâu xấp xỉ nghiệm khá tốt, với sai số theo chuẩn L_2 nhỏ.
- Phương pháp này không bị ảnh hưởng quá nhiều bởi số chiều, có tiềm năng giải các bài toán có số chiều lớn.
- Các ví dụ đã được thử nghiệm cho thấy, quá trình tính toán diễn ra một cách thuận lợi, không yêu cầu quá nhiều thời gian và chỉ cần tài nguyên

tính toán cơ bản.

- Bên cạnh đó, việc xử lý điều kiện biên không đơn giản như các phương pháp truyền thống. Dựa vào kết quả thu được, trong tương lai, việc nghiên cứu sâu hơn về việc lựa chọn trọng số cho điều kiện biên, hoặc tìm cách khác để mô hình thoả mãn điều kiện biên, có thể giúp cải thiện độ chính xác của mô hình.
- Sai số của nghiệm thu được không tỉ lệ nghịch với độ phức tạp của mô hình. Nghĩa là, khi mạng nơ-ron có nhiều khối hơn, nhiều tham số hơn, sai số của nghiệm với nghiệm chính xác chưa chắc đã giảm.
- Sai số tại từng điểm cũng khó kiểm soát hơn so với các phương pháp truyền thống. Trong ví dụ 2, ta có thể thấy nghiệm thu được từ phương pháp sai phân hữu hạn có sai số nhỏ khi tính các giá trị gần biên, nhưng nghiệm thu được từ phương pháp Ritz sâu thì không có xu hướng rõ ràng về sai số ở các mô hình khác nhau.

Ngoài ra, việc xây dựng cấu trúc của mô hình (số lớp, số nút, số khối, hàm kích hoạt), thuật toán tối ưu là vấn đề chung của các bài toán được xử lý bằng mô hình mạng nơ-ron.

KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

Các kết quả nghiên cứu chính của luận văn bao gồm:

- Trình bày về cách tiếp cận theo hướng biến phân của phương trình elliptic.
- Trình bày về phương pháp Ritz cổ điển để giải bài toán biến phân.
- Trình bày về phương pháp Ritz sâu để giải bài toán biến phân.
- Thực nghiệm một số ví dụ thông qua phương pháp Ritz sâu bằng các mô hình có cấu trúc khác nhau. Ngoài ra, nghiệm xấp xỉ bằng các phương pháp cổ điển cũng được trình bày để thấy sự ưu việt của phương pháp Ritz sâu.

Dựa vào các kết quả đã đạt được, một số hướng phát triển của luận văn như sau:

- Xem xét cách xây dựng cấu trúc của mạng nơ-ron trong phương pháp Ritz sâu.
- Kiểm soát được sai số của nghiệm xấp xỉ từ phương pháp Ritz sâu so với nghiệm chính xác.

Tài liệu tham khảo

- [1] W. E, B. Yu. The Deep Ritz Method: A Deep Learning-Based Numerical Algorithm for Solving Variational Problems. *Communications in Mathematics and Statistics*, 6:1, 2017.
- [2] J. Chen. A Comparison Study of Deep Galerkin Method and Deep Ritz Method for Elliptic Problems with Different Boundary Conditions. *Communications in Mathematical Research*, 36(3):354–376, jun 2020.
- [3] M. Liu, Z. Cai. Adaptive two-layer ReLU neural network: II. Ritz approximation to elliptic PDEs. *Computers & Mathematics with Applications*, 113:103–116, 2022.
- [4] Y. Liao, P. Ming. Deep Nitsche method: deep Ritz method with essential boundary conditions. *Communications in Computational Physics*, 29(5):1365–1384, 2021.
- [5] M. Liu, Z. Cai, J. Chen. Adaptive two-layer ReLU neural network: I. Best least-squares approximation. *Computers & Mathematics with Applications*, 113:34–44, 2022.
- [6] H. Royden, P. Fitzpatrick. *Real Analysis (4th Edition)*. Prentice Hall, 4th edition, 2010.

- [7] H. Brezis. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [8] L. C. Evans. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Providence, R.I, 2010.
- [9] D. P. Kingma, J. Ba. Adam: A Method for Stochastic Optimization, 2017.
- [10] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville. *Deep Learning*. The MIT Press, 2016.
- [11] G. V. Cybenko. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals and Systems*, 2:303–314, 1989.
- [12] K. He, X. Zhang, S. Ren, J. Sun. Deep Residual Learning for Image Recognition. pages 770–778, 2016.
- [13] R. L. Burden, J. D. Faires. *Numerical Analysis*. Brooks/Cole Cengage Learning, 9th ed edition, 2011.