

APROXIMANTES DE MÁXIMA ENTROPÍA DE SEGUNDO ORDEN

A.B. Ridolfi^{a,c}, A. Rosolen^b, D. Millán^{a,d} y V. N. Vera de Serio^c

^aFacultad de Ciencias Aplicadas a la Industria, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina

^bQuantlab MA, Inc., 10 Summer St., Boston, U.S.

^cFacultad de Ciencias Económicas, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza Argentina,
virginia.vera@fce.uncu.edu.ar

^dCONICET, rdanielmillan@gmail.com

Resumen: En este trabajo presentamos una forma de abordar la resolución de un problema de optimización convexa infactible para obtener aproximantes de segundo orden de máxima entropía. El esquema de aproximaciones locales de segundo orden de máxima entropía se puede utilizar como base para la resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales de cuarto orden dentro de la formulación del método de Galerkin sin malla.

Palabras clave: *máxima entropía, teoría de aproximación, teoría de la información*

2000 AMS Subject Classification: 94A17 - 65M60

1. INTRODUCCIÓN

Algunos procesos físicos que se observan en la naturaleza se describen mediante sistemas de ecuaciones en derivadas parciales (EDPs), cuyas soluciones se obtienen de forma numérica mediante simulaciones computacionales. En general se necesita resolver un sistema de ecuaciones algebraicas que se obtiene al utilizar el método de Galerkin para discretizar la forma débil. La técnica más utilizada en simulaciones numéricas es el método de los elementos finitos (MEF), sin embargo ésta se basa en el empleo de funciones de forma de continuidad C^0 [1] y no se puede aplicar en problemas que requieren mayor continuidad [2]. La necesidad de contar con funciones de forma de mayor regularidad motivó el desarrollo de métodos sin malla de continuidad C^k [3], como también la utilización de B-splines [4], superficies de subdivisión [5], análisis isogeométrico (IGA, [6]), y aproximantes de máxima entropía [7], [8], [9], [10], [12].

La motivación principal de este trabajo es el estudio de sistemas cuyo modelado requiere la resolución de EDPs no lineales de cuarto orden, que se caracterizan por tener derivadas de hasta segundo orden en su forma débil. En la actualidad, la disponibilidad de aproximantes suaves, no negativos y de soporte compacto, en discretizaciones no estructuradas para tratar EDPs de alto orden se presenta como un problema abierto en 2D y 3D. En la última década se ha incrementado el interés en aproximantes suaves debido a su creciente demanda, por ejemplo en problemas de multifísica que involucran interfases móviles o de discontinuidad libre cuya ubicación no es conocida a priori.

Este trabajo consiste en el desarrollo de aproximantes suaves, no negativos, que cumplen las condiciones de consistencia de hasta segundo orden, basados en el principio de máxima entropía, y cuyo soporte efectivo es acotado en un subintervalo del dominio. Para ello se aborda un problema de optimización convexo infactible en 1D a través de la resolución de un problema factible aproximado.

2. APROXIMANTES DE MÁXIMA ENTROPÍA

Desde el enfoque de la teoría de la información, se han realizado esfuerzos [8], [13] para expresar la aproximación de una función como combinación lineal de valores nodales asociados a una distribución de puntos no estructurada $X = \{\mathbf{x}_a\}_{a=1,\dots,N} \in \mathbb{R}^d$ y funciones base (desconocidas), $u(\mathbf{x}) \approx u^h(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^N p_a(\mathbf{x}) u_a$. Se requiere que estas funciones satisfagan las condiciones de consistencia de cero y primer orden, las cuales son $\sum_{a=1}^N p_a(\mathbf{x}) = 1$ y $\sum_{a=1}^N p_a(\mathbf{x}) \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$ respectivamente, de manera que las funciones afines sean reproducidas exactamente. Como requerimiento fundamental se impone la no negatividad de las funciones base $p_a(\mathbf{x}) \geq 0$. Estas se obtienen resolviendo un programa de optimización convexa que maximiza la medida de entropía de Shannon–Jaynes [14], [15]

$$H(p_1(x), p_2(x), \dots, p_N(x)) = - \sum_{a=1}^N p_a(x) \ln p_a(x).$$

2.1. APROXIMANTES DE SEGUNDO ORDEN EN R (1D)

Consideramos ahora nodos en R (1D). Para obtener aproximantes de máxima entropía de segundo orden [12], [10], de manera que un polinomio de segundo orden pueda ser reproducido exactamente, se debe agregar la condición $\sum_{a=1}^N p_a(x) x_a^2 = x^2$. Esto produce, salvo en los puntos nodales, restricciones infactibles.

A fin de salvar esta infactibilidad proponemos resolver el siguiente programa de optimización convexa

$$\begin{aligned}
 \text{(SME) Para } x \text{ fijo, maximizar } & - \sum_{a=1}^{N+1} s_a(x) \ln s_a(x) \\
 \text{subjeto } & s_a(x) \geq 0, \quad a = 1, \dots, N \\
 & \sum_{a=1}^{N+1} s_a(x) = 1 \\
 & \sum_{a=1}^{N+1} s_a(x) \frac{x_a + x_{a-1}}{2} = x \\
 & \sum_{a=1}^{N+1} s_a(x) x_a x_{a-1} = x^2,
 \end{aligned}$$

donde $x_0 = x_1$ y $x_{N+1} = x_N$.

En la Figura 1 se muestra la factibilidad de esta formulación agregando puntos de control.

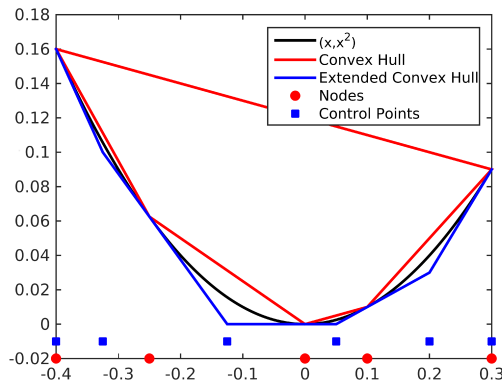


Figura 1: Cápsula convexa

Se reescribió el problema centrando las condiciones de consistencia y se obtuvieron computacionalmente mediante un algoritmo de Newton-Raphson los multiplicadores de Lagrange. Siguiendo el método de dualidad [13] e introduciendo la función de partición

$$Z(x, \lambda, \mu) = \sum_{a=1}^{N+1} \exp[\lambda d_a - \mu c_a],$$

la solución óptima se puede expresar como

$$s_a(x) = \frac{\exp[\lambda^*(x)d_a - \mu^*(x)c_a]}{Z(x, \lambda^*(x), \mu^*(x))},$$

donde

$$d_a(x) = \frac{x_a + x_{a-1}}{2} - x \quad \text{y} \quad c_a(x) = (x_a - x)^2 + (x_{a-1} - x)^2 - (x_a - x_{a-1})^2,$$

para $a = 1, \dots, N + 1$.

Los multiplicadores de Lagrange óptimos se obtienen minimizando la función dual de Lagrange

$$\hat{g}(\lambda, \mu) = \ln Z(x, \lambda, \mu).$$

Observar que para $x \neq x_a$; $a = 1, \dots, N + 1$ las condiciones de consistencia son estrictamente factibles, es decir

$$(x, x^2) \in \text{int} \left[\text{conv} \left\{ \left(\frac{x_a + x_{a-1}}{2}, x_a x_{a-1} \right), a = 1, \dots, N + 1 \right\} \right],$$

y con argumentos similares a los utilizados en [13] y en [10] se puede afirmar que el problema de optimización dual, suave y estrictamente convexo, tiene solución única y puede ser eficientemente obtenida usando el método de Newton.

La Figura 2 muestra las funciones base $s_a(x)$ obtenidas para un conjunto de 9 nodos (y por lo tanto 10 puntos de control) en el intervalo $[0,1]$, se puede apreciar la suavidad de las mismas. Mientras que la Figura 3 muestra la reconstrucción de una función cuadrática, donde los pesos en los puntos de control han sido obtenidos mediante la resolución de un problema de mínimos cuadrados.

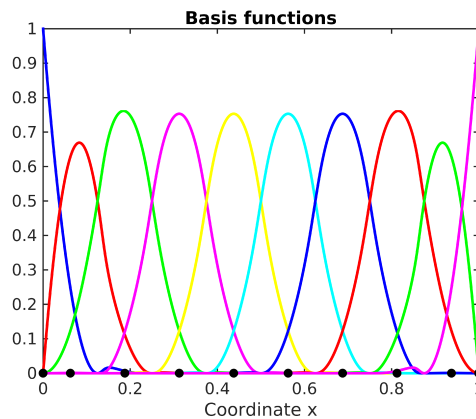


Figura 2: Funciones base.

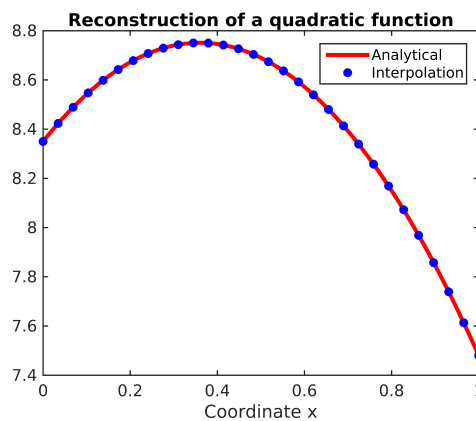


Figura 3: Reconstrucción de una función cuadrática.

3. COMENTARIOS

En este trabajo se presenta un esquema de optimización convexa de máxima entropía que permite obtener funciones base que cumplen las condiciones de consistencia de hasta segundo orden, para lo cual se ha

ampliado la envolvente convexa. Sin embargo, esta envolvente es idéntica a la función cuadrática en los nodos originales, lo que implica un caso degenerado (no es estrictamente factible en los nodos), esto se podría mejorar introduciendo una traslación en las rectas tangentes a los nodos interiores y reformulando el problema de optimización. Otra línea de actuación a explorar, es a través de considerar un esquema simétrico respecto a los nodos de los puntos de control, de forma similar a lo que se realiza para obtener curvas de Bezier.

REFERENCIAS

- [1] O. C. ZIENKIEWICZ, *The finite element method in engineering science*, McGraw-Hill, 1971.
- [2] D. MILLÁN, A. ROSOLEN, AND M. ARROYO, *Thin shell analysis from scattered points with maximum entropy approximants*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 85(6)(2011), pp.723-751.
- [3] T. BELYTSCHKO, Y. LU, AND L. GU., *Element free galerkin methods*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 37(1994), pp.229-256.
- [4] P. KAGAN, A. FISCHER, AND P.Z. BAR-YOSEPH., *New b-spline finite element approach for geometrical design and mechanical analysis*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 41(3)(1998), pp.435-458.
- [5] F. CIRAK AND Q. LONG., *ubdivision shells with exact boundary control and non-manifold geometry*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 88(9)(2011), pp.897-923.
- [6] T.J.R. HUGHES, J.A. COTTRELL, AND Y. BAZILEVS., *Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement*, Comput. Meth. App. Mech. Eng., 194(2005), pp.4135-4195.
- [7] M. ARROYO AND M. ORTIZ., *Local maximum-entropy approximation schemes: a seamless bridge between finite elements and meshfree methods*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 65(13)(2006), pp.2202-2006.
- [8] N. SUKUMAR, *Construction of polygonal interpolants: a maximum entropy approach*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 61(12)(2004), pp.2159-2181.
- [9] A. ROSOLEN, D. MILLÁN, AND M. ARROYO, *On the optimum support size in meshfree methods: a variational adaptivity approach with maximum entropy approximants*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 82(7)(2010), pp.868-895.
- [10] A. ROSOLEN, D. MILLÁN, AND M. ARROYO, *Second order convex maximum entropy approximants with applications to high order PDE*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 94(2)(2013), pp.150-182.
- [11] A. ROSOLEN AND M. ARROYO, *Blending isogeometric analysis and maximum entropy meshfree approximants*, Comput. Meth. App. Mech. Eng. 264(2013), pp.95-107.
- [12] C. CYRON, M. ARROYO AND M. ORTIZ, *Smooth, second order, non-negative meshfree approximants selected by maximum entropy*, International Journal for Numerical Methods in Engineering. 79(2009), pp.1605-1632.
- [13] M. ARROYO AND M. ORTIZ, *Local maximum entropy approximation schemes: a seameless bridge between finite elements and meshfree methods*, International Journal for Numerical Methods in Engineering. 65(13)(2006), pp.2167-2202.
- [14] C. SHANNON, *A mathematical theory of communication*, The Bell System Tecnical Journal. 27(1948), pp.623-656.
- [15] E. JAYNES, *Information theory and statistical mechanics*, Physics Reviews. 106(1957), pp.620-630.