

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

В.И. Горбаченко

Пензенский государственный педагогический университет
им. В.Г. Белинского,
г. Пенза

Вычислительные возможности нейронных сетей основаны на превосходных аппроксимационных свойствах, совпадении нейросетевого вычислительного базиса с логическим базисом численных методов и способности сети к обучению.

Рассмотрим решение некоторых типичных классов задач вычислительной математики на нейронных сетях. Решение системы линейных алгебраических уравнений [1, 2] $\mathbf{Ax} = \mathbf{f}$ сводится к минимизации функционала

$$H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{f}\|^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{Ax}, \mathbf{x}) - (\mathbf{Ax}, \mathbf{f}) + \frac{1}{2}(\mathbf{f}, \mathbf{f})$$
 градиентным методом
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \eta \cdot \text{grad } H(\mathbf{x}^{(k)}), \quad (1)$$

где $\mathbf{x}^{(k)}$ – вектор k -го приближения к решению; η – скалярный параметр (параметр настройки); $\text{grad } H(\mathbf{x}^{(k)}) = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{f} - \mathbf{A}^T \mathbf{f} = \mathbf{A}^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{f}) = \mathbf{A}^T \mathbf{r}^{(k)}$, $\mathbf{r} = \mathbf{Ax} - \mathbf{f}$.

Для реализации алгоритма (1) используем линейную нейронную сеть, первый слой которой вычисляет градиент функционала, представляющий собой невязку системы линейных алгебраических уравнений, полученной из исходной трансформацией Гаусса $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{f}$. Второй слой вычисляет новое приближение решения (1). Сеть представляет собой инверсную нейронную сеть, у которой по градиентному алгоритму обучается входной вектор, а веса определяются матрицей решаемой системы. Сеть является рекуррентной, так как выходной сигнал подается на вход и может рассматриваться как дискретная сеть Хопфилда. Точка устойчивого равновесия сети является решением системы [2].

Рассмотрим нейросетевой алгоритм решения системы нелинейных уравнений $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$, где $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ – вектор-функция. В [3] доказано, что при решении системы методом Ньютона и аппроксимации вектор-функции $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ двухслойной сетью прямого распространения с логистической функцией активации первого слоя и линейной функцией активации второго слоя матрица Якоби $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})$ на k -й итерации может быть аппроксимирована выражением

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)}) = \mathbf{W}_2 \mathbf{D}(\mathbf{x}^{(k)}) (\mathbf{E} - \mathbf{D}(\mathbf{x}^{(k)})) \mathbf{W}_1,$$

где \mathbf{W}_1 и \mathbf{W}_2 – матрицы весов первого и второго слоев; $\mathbf{D}(\mathbf{x}^{(k)})$ – диагональная матрица, построенная из значений выходов первого слоя сети.

То есть весьма громоздкие вычисления Якобиана и вектор-функции заменяются работой с нейронной сетью.

Нейронные сети могут применяться для решения краевых задач математической физики. Для решения систем разностных уравнений, получаемых в методе конечных разностей, можно использовать клеточные нейронные сети, шаблон связей которых совпадает с конечно-разностным шаблоном. Так как матрица системы разностных уравнений зачастую является положительно определенной, то можно использовать функционал минимизации [2]

$H_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*), (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*))$, что исключает трансформацию Гаусса, упрощает сеть и резко сокращает время решения.

Перспективным является использование радиально-базисных нейронных сетей для решения краевых задач теории поля [4, 5]. Радиально-базисная нейронная сеть представляет собой сеть, первый слой которой осуществляет преобразование входного вектора \mathbf{X} пространственных координат с использованием радиально-базисных функций (RBF), например, Гауссиана $\varphi_k(\mathbf{x}) = \exp(-r_k^2/a_k^2)$, где \mathbf{x} – входной вектор; r_k – радиус $r_k = \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|$; \mathbf{c}_k – вектор центра RBF, a – параметр функции, называемый шириной. Второй слой сети представляет собой линейный

сумматор, и выход сети описывается выражением $u = \sum_{k=1}^N w_k \varphi_k(\mathbf{x})$, где w_k –

вес, связывающий выходной нейрон с k -м нейроном скрытого слоя. Последнее выражение представляет собой формулу метода коллокаций для решения дифференциальных уравнений. Решение уравнения сводится к настройке весов, ширины и расположения центров нейронов, минимизирующих функционал ошибки, для уравнения в операторной форме $Lu(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ с граничными условиями $Bu(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$, имеющий вид

$$I(\mathbf{X}_i, w, c, a) = \sum_{i=1}^N [Lu(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_i)]^2 + \lambda \sum_{j=1}^K [Bu(\mathbf{x}_j) - g(\mathbf{x}_j)]^2,$$

где λ – штрафной множитель; N и K – количество внутренних и граничных контрольных точек.

Рассмотренное представление решения и вид базисных функций позволяют вычислить частные производные решения и градиенты функционала по весам, центрам и ширине. Корректировка весов, центров и ширины производится по известным градиентным алгоритмам, например, по алгоритму скорейшего спуска. Принципиально важно, что множество точек коллокации должно быть случайным.

Перспективно применение нейронных сетей для решения обратных задач математической физики. Принципиально возможно решить любую обратную задачу, обучая нейронную сеть на множестве решений прямой задачи при разных значениях искомым параметров. Более универсальными являются градиентные методы решения обратных задач, основанные на применении нейронных сетей для решения сопряженных задач [5]. Рассмотрим идею подхода на примере решения нелинейной стационарной коэффициентной обратной задачи, описываемой уравнением

$$f - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial z} \right) = 0, \quad (x, y, z) \in V \quad (2)$$

с граничными условиями третьего рода на границе области S

$$\alpha(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} + \beta(x, y, z)u + \gamma(x, y, z) = 0, \quad (x, y, z) \in S. \quad (3)$$

Зависимость $k(u)$ неизвестна, и ее необходимо найти по приближенно известным в результате измерений значениям решения φ_m в некотором множестве z_m точек $u(z_m) \approx \varphi_m$, $m = 1, 2, \dots, M$. При использовании градиентных методов

минимизируется функционал $J(k) = \sum_{m=1}^M (u(z_m, k) - \varphi_m)^2$, градиент которого для

области решения V равен [5] $J'_k = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial z}$. А для граничной

поверхности S градиент равен $J'_k = -\psi \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}$. Здесь u – решение прямой задачи (2)

– (3); ψ – решение сопряженной задачи, описываемой уравнением

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \sum_{m=1}^M (u - \varphi_m) \delta(x - z_m), \quad (4)$$

с граничными условиями $\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\beta}{\alpha} \psi = 0$, где $\delta(x - z_m)$ – дельта-функция.

Для решения прямой и сопряженной задач предлагается использовать радиально-базисные нейронные сети. Алгоритм решения строится следующим образом. Задается некоторое приближение зависимости $k(u)$. С помощью радиально-базисной нейронной сети при зафиксированных значениях $k(u)$ решаются линейные прямая задача и сопряженная задача. Если решение прямой задачи обеспечивает приемлемое значение функционала ошибки в узлах некоторой сетки, то решение завершается. В противном случае по полученным решениям вычисляются пространственные производные на сетке, и определяется сеточный эквивалент градиента функционала. Причем дополнительных затрат на вычисление пространственных производных не требуется, так как они вычисляются в процессе решения задачи на радиально-базисной сети. Далее одним из градиентных методов корректируется вектор искомых коэффициентов.

Так как обратные задачи являются некорректными, то для их решения применяются методы регуляризации. В данном алгоритме целесообразно применить итерационную регуляризацию, использующую в качестве параметра регуляризации число итераций.

Работа выполнена по тематическому плану научно-исследовательских работ Пензенского государственного педагогического университета, проводимых по заданию Федерального агентства по образованию.

Библиографический список

1. Нейроматематика / А.Д. Агеев, А.Н. Балухто, А.И. Галушкин, В.И. Горбаченко и др. – М.: ИПРЖР, 2002. – 448 с.
2. Горбаченко, В.И. Нейрокомпьютеры в решении краевых задач теории поля. – М.: Радиотехника, 2003. – 336 с.
3. Горбаченко, В.И. Использование нейронных сетей для решения систем нелинейных уравнений / В.И. Горбаченко, Г.Ф. Убиенных, С.А. Москвитин // Нейрокомпьютеры: разработка и применение. – 2005. – № 7. – С. 28 – 33.
4. Тархов, Д.А. Нейронные сети. Модели и алгоритмы. – М.: Радиотехника, 2005. – 256 с.
5. Горбаченко, В.И. Нейросетевые алгоритмы решения краевых задач теории поля // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. – 2007. – С. 13 – 20.