

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА С ПОМОЩЬЮ АППРОКСИМАЦИИ СИГМОИДАЛЬНЫМИ ФУНКЦИЯМИ

К. А. Стародубец^{1, 2}, Е. И. Несмиянов^{1, 3}

¹ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

²Уральский Федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

В последние годы приобрели популярность методы машинного обучения для решения дифференциальных уравнений[1]. Такой подход основывается на теоремах Колмогорова–Арнольда [2] и Цыбенко[3] о представлении функции в виде нейронной сети – суммы параметризованных сигмоидальных преобразований одномерных линейных функций. Данная методика схожа с методом Галёркина [4], где в качестве базисных функций выбираются функции активации, удовлетворяющих требованиям теорем. Эти аппроксимации позволяют учитывать нелинейный и даже разрывный характер поведения исходной функции.

В качестве тестового примера решение уравнения математической физики в классе бесконечно гладких сигмоидальных функций в работе рассматривается одномерное линейное уравнение переноса с разрывным начальным условием в виде ступеньки:

$$u_t + au_x = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad u(x, 0) = u_0 = \begin{cases} 2, & x \leq 0,5 \\ 1, & x > 0,5 \end{cases}, \quad (1)$$

где константа a – скорость переноса. Нейросетевое решение уравнения было проверено сравнением с точным решением: $u(x, t) = u_0(x - at)$.

Для решения уравнения (1) выбрана аппроксимация с помощью однослойной нейронной сетью с сигмоидальной функцией:

$$u(x, t) \approx U(x, t) = \sum_{i=1}^K W_i \sigma(A_i x + B_i t + C_i) + D, \quad (2)$$

где W_i , A_i , B_i , C_i , D (3) – поисковые параметры («веса») нейронной сети, $\sigma(s) = 1/(1 + \exp(-s))$, K – число нейронов.

Современные программные технологии тензорной библиотеки torch позволяют эффективно использовать продвинутые математические алгоритмы при работе с нейронными сетями. Для задач оптимизации предоставляются модификации стохастического градиентного спуска для произвольного количества параметров. Также предусмотрено вычисление точных производных функций от поисковых параметров (3) методами автоматического дифференцирования. Поэтому для решения уравнения переноса можно записать производные от аппроксимации (2), что позволяет аппроксимировать дифференциальную часть:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{\partial U}{\partial t} + a \frac{\partial U}{\partial x}, \\ \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} &= \sum_{i=1}^K W_i A_i \sigma'(A_i x + B_i t + C_i), \\ \frac{\partial U(x, t)}{\partial t} &= \sum_{i=1}^K W_i B_i \sigma'(A_i x + B_i t + C_i), \end{aligned} \quad (4)$$

где $\sigma'(s) = \sigma(s)(1 - \sigma(s))$.

Последним шагом осуществляется минимизация по параметрам (3) невязки L в виде суммы норм L^2 дифференциального уравнения и начальных условий с использованием оптимизатора Adam из модуля torch языка Python:

$$L = \left\| \frac{\partial U}{\partial x} + a \frac{\partial U}{\partial t} \right\|_{L^2} + \|U_0 - u_0\|_{L^2} \rightarrow 0. \quad (5)$$

Было выяснено, что за счет выбранного класса бесконечно гладких сигмоидальных функций (2) при большом значении поискового параметра A при x достигается необходимая точность описания разрыва (см. рис. 1) для всего интервала времени t . Это позволяет получить разрывное решение уравнения переноса с необходимой точностью.

Также проводится сравнение точностей полученного нейросетевого решения с сеточными методами различного порядка точности.

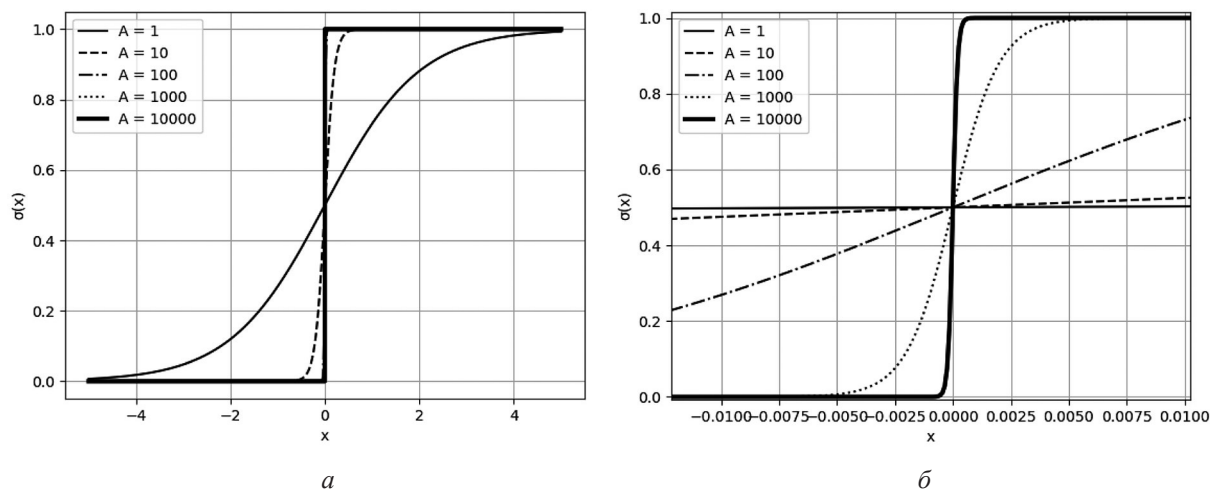


Рис. 1. Стягивание сигмоиды в функцию Хевисайда в зависимости от параметра при x :

a – область определения от -5 до 5 ; b – увеличение в 800 раз

Литература

1. **Raissi, M.** Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [Text] / M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis // J. Comput. Phys. – 2019. – Vol. 378. – P. 686–707.
2. **Колмогоров, А. Н.** О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиции непрерывных функций одного переменного [Текст] // Доклады АН СССР. – 1957. – Т. 114. – С. 953–956.
3. **Cybenko, G. V.** Approximation by Superpositions of Sigmoidal function [Text] // Mathematics of Control Signals and Systems. – 1989. – Vol. 2. – P. 303–314.
4. **Sirignano, J. A.** DGM: A deep learning algorithm for solving Partial Differential Equation [Text] / J. A. Sirignano, K. Spiliopoulos // J. Comput. Phys. – 2017. – Vol. 375. – P. 1339–1364.