Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Önálló Szakmai Projekt

Parciális differenciálegyenletek numerikus megoldása neurális hálókkal

Témavezető:
Izsák Ferenc
Egyetemi docens

Készítette:
Miskei Ferenc István
Alkalmazott Matematikus MSc

Budapest, 2021

Bevezetés

A parciális differenciálegyenletek tanulmányozása, illetve megoldása rendkívül fontos terület az alkalmazott tudományokban, mint például a fizikában, kémiában, mérnöki tudományokban. Ezeknek az egyenleteknek gyakran reménytelenül nehéz zárt alakban „megoldóképletet” találni, ezért a megoldáshoz tradicionálisan numerikus módszereket alkalmazunk. A hagyományos végeselem módszereknél egy fokkal újabb ötlet a neurális hálók ilyen célú alkalmazása, amely igen ígéretes eredményekkel kecsegtet. Várhatóan bonyolultabb egyenletek néhány pontbeli közelítő értékét kevesebb információ alapján, kisebb hibahatárral képesek meghatározni ezen eszközök [3].

Célunk ebben a projektben egy, a Laplace-egyenletre már működő programot úgy módosítani, hogy az a Poisson egyenlet megoldására is alkalmas legyen. Ez várhatóan numerikusan jóval drágább feladat, mint Laplace-egyenlet, hiszen – a Laplace-egyenlettel ellentétben – nem elegendő információt szereznünk a tartomány peremén a függvényről, hanem valamilyen mérési eredményeket be kell építenünk a tartomány belsejéből is ahhoz, hogy sikeresen fel tudjuk térképezni az f függvényt, és ezáltal a PDE megoldását is. A megoldóprogram szükséges módosításai után numerikus kísérleteket lesz célszerű végezni azzal kapcsolatban, hogy mennyi információt kell gyűjtenünk a tartomány határáról, illetve a belsejéből, valamint hogyan strukturáljuk a neurális hálót úgy, hogy az minél gazdaságosabban oldja meg a Poisson-egyenletet, valamint adott esetben más PDE-ket is.

1. fejezet

Problémafelvetés

Tekintsük a szokásos Laplace-egyenletet. Legyen $n \in \mathbb{N}^+$, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ összefüggő nyílt Lipschitz-tartomány, $g\colon \partial\Omega \to \mathbb{R}$.

$$\left.\begin{aligned} \Delta u(x) &= 0 \quad (x \in \Omega), \\ u|_{\partial\Omega}(x) &= g(x). \end{aligned}\right\} \tag{1.1}$$

A parciális differenciálegyenletek elméletéből ismeretes, hogy a $-\Delta$ operátorra vonatkozó alapmegoldás, vagyis a $-\Delta u = \delta_0(x)$ disztribúció értelemben vett PDE megoldása:

$$E_n(x) := \begin{cases} -\frac{1}{2\pi} \ln \|x\|_2, & \text{ha } n = 2, \quad x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}, \\ \frac{1}{(n-2) S_n \|x\|_2^{n-2}}, & \text{ha } n \geqq 3, \quad x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}, \end{cases} \tag{1.2}$$

ahol S_n az n dimenziós egységgömb (hiper)felülete.

A [2] cikk működő modellt mutat arra, hogy egy nemtriviális $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ tartomány néhány $\{x_1, \ldots, x_I\}$ pontjára vonatkozóan (1.1) jó közelítő értékeit nyerhetjük a következő módon:

- vegyük $\partial\Omega$ néhány pontját ($\{z_1, \ldots, z_K\} \subset \partial\Omega$),
- vegyük $\operatorname{ext}\Omega$ néhány pontját $y_j \notin \overline{\Omega}, j \in \{1, \ldots, J\}$
- tekintsük a $T_{y_j}(x) := E_2(x - y_j)$, Green-függvényeket, valamint
- tekintsünk ekkor egy egyrétegű, sűrű neurális hálót, amelyet az

  $$\left\{(T_{y_j}(z_1), T_{y_j}(z_2), \ldots, T_{y_j}(z_K)), (T_{y_j}(x_1), T_{y_j}(x_2), \ldots, T_{y_j}(x_M))\right\}_{j=1}^{N}$$

  tanítóhalmazon tanítunk,
- ekkor az NN elfogadhatóan pontos becsléseket ad az $\{u(z_k)\}_{k=1}^K$ értékek alapján az $\{u(x_i)\}_{i=1}^I$ függvényértékekre ismert u harmonikus függvény esetén.

Célunk egy olyan NN fejlesztése – beleértve a tanítófüggvények és az alappontok alkalmas megválasztását – amely a Laplace egyenlet helyett képes bizonyos speciális $f\colon \Omega \to \mathbb{R}$ jobboldali függvények mellett a

$$\left.\begin{aligned} \Delta u(x) &= f(x) \quad (x \in \Omega), \\ u|_{\partial\Omega}(x) &= g(x). \end{aligned}\right\} \tag{1.3}$$

Poisson-egyenletnek is egy hasonlóan jó tulajdonságokkal rendelkező közelítő megoldását megadni.

Vélhetően ehhez az f függvény bizonyos helyettesítési értékeit is bele kell venni valamilyen módon a tanulóhalmazba, valamint az alkalmazásokban előforduló f függvények esetén reménytelen partikuláris megoldást találni, amivel – az alapmegoldások mintájára – taníthatnánk a neurális hálót. Kérdés tehát, hogy az alapmegoldáshok helyett milyen függvényeket alkalmazzunk. Néhány intuitívan adódó elképzelés az alkalmazandó T függvények tulajdonságaira

- radiális függvények, hiszen ortogonális transzformációkra a Δ operátor invariáns
- a numerikus kezelhetőség érdekében a szingularitásaik (ha vannak) az Ω tartomány külső pontjaiban lehetnek, hasonlóan a kiindulási problémához
- legyen az $\{\Delta R_\alpha\}$ halmaz lineáris burka sűrű valamilyen normában (például $\|.\|_{H^1}$ normában a $H^1(\Omega)$ függvénytéren), hogy esélyünk legyen különböző, de megfelelően általános f jobboldalak esetére általánosítani a módszert.

Ilyen jó tulajdonságokkal rendelkező függvényosztályra általános választ egyelőre nem ismerünk. A [] forrás a (r) alakú függvényeket javasolja hasonló alkalmazásokra.

A probléma megoldása során esetleg érdemes lehet a NN-ban a sűrű kötés helyett esetleg alkalmas konvolúciós kötéseket használni több réteggel, habár a módszer leginkább egy lineáris regresszióra emlékeztet, így ez nem kecsegtet nyilvánvaló előnyökkel.

Alakítsuk át a tanulóhalmazt az alábbi módon. Legyenek adottak $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ korlátos nyílt Lipschitz-tartomány, valamint

- $x_i \in \Omega$ néhány belső pontja, ahol a függvényértéket majd szeretnénk megtudni
- $y_j \in \mathbb{R}^n$ alappontok, amelyekre
- R_{y_j} radiális függvényeket helyezünk, végül
- $z_k \in \partial\Omega$ határpontok.

Legyen továbbá az NN tanítóhalmaza

$$\underbrace{((\Delta R_{y_j}(X)), (R_{y_j}(z_k)))}_{inputok}, (R_{y_j}(x_1), R_{y_j}(x_2), \ldots, R_{y_j}(x_M)),$$

ahol $X = \{x_i\}_{i=1}^I \cup \{y_j\}_{j=1}^J$.
Ekkor a teszthalmaz az

$$\underbrace{((f(x_l)), (g(z_k)))}_{inputok}, (\ldots)$$

alakot ölti.

Irodalomjegyzék

[1] Cheng, A.H.D and Hong, Y.: An overview of the method of fundamental solutions—Solvability, uniqueness, convergence, and stability, Engineering Analysis with Boundary Elements 120, pp. 118-152, 2020.
idemajdkelllink

[2] Haffner, D. and Izsák, F.: Solving the Laplace equation by using neural networks, to appear in Annales Univ. Sci. Budapest., Sec. Math.
idemajdkelllink

[3] Isaac Elias Lagaris, Aristidis Likas and Dimitrios I. Fotiadis: Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations, IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 9, no. 5, 1998. szeptember
https://faculty.sites.iastate.edu/hliu/files/inline-files/Anns_lagaris1998_0.pdf