УДК 004.032.26:532.516(045)
DOI: 10.18372/2310-5461.38.12823

О. М. Глазок, канд. техн. наук, доц.
Національний авіаційний університет
orcid.org/0000-0002-1888-8779
e-mail: kozalg@ukr.net;

ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ГІДРОДИНАМІЧНИХ ЗАДАЧ З ВИКОРИСТАННЯМ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Вступ

Моделювання руху рідин та газів є однією з актуальних задач чисельного моделювання. За відсутності методів отримання аналітичних розв'язків систем рівнянь, що описують ці процеси, головним підходом є чисельні методи розв'язання. Задача пошуку чисельного розв'язку гідродинамічної задачі у обмеженій ділянці площини або простору зводиться до визначення дискретної обчислювальної сітки та знаходження у точках сітки таких значень кількох функцій, які з заданою точністю відповідають математичним умовам, визначеним системою нелінійних рівнянь Нав'є-Стокса, або похідними від них, що описують закони руху середовища, та граничними умовами. Як показують оцінки, наприклад [1], чисельне розв'язання гідродинамічних задач потребує задіяння значних обчислювальних ресурсів.

Машинне навчання є областю, що стрімко розвивається. Основні застосування підходів машинного навчання — розв'язання задач класифікації, кластеризації, регресії — переважно знаходять застосування у розв'язанні задач у сферах розпізнавання образів, прогнозування, добування даних тощо. Важливою передумовою до розповсюдження методів машинного навчання стала зростаюча доступність паралельних обчислень з використанням багатоядерних комп'ютерних систем та графічних процесорів.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

За останнє десятиріччя була розроблена ціла низка програмних інструментів, що реалізують важливі інтелектуальні та математичні алгоритми, необхідні для побудови систем машинного навчання, і таким чином значно полегшують побудову систем для інтелектуального розв'язання саме обчислювальних задач. До таких систем, зокрема, можна віднести: MMLF, бібліотека та сервіси OpenAI Gym, PyBrain, RLPy, scikit–learn [2], а також; TensorFlow, Theano, Torch, Caffe, NumPy та ін. Розвиток цих та інших інструментів зробив можливим просту реалізацію методів машинного навчання, Запропоновано низку застосувань методів машинного навчання в розв'язанні гідродинамічних задач [3; 4]. Однак, у цілому ці застосування стосуються не внутрішньої механіки гідродинамічних процесів, а їх зовнішніх характеристик та впливу на навколишнє середовище або діяльність людей. Відповідно, рішення, запропоновані авторами досліджень, орієнтовані на оцінку зовнішнього боку явищ, а не на методи та алгоритми розв'язання задач механіки неперервних середовищ на основі відповідних математичних моделей.

Сучасні нейронні мережі є нелінійним статистичним інструментом моделювання даних. Їх застосовують для моделювання складних взаємозв'язків між входами та виходами, для пошуку закономірностей в даних, або для виявлення статистичної структури в невідомому спільному розподілі ймовірності спостережуваних величин. Важливою особливістю нейромережевого підходу є стійкість нейромережевої моделі відносно до помилок в даних, а саме неточностей у визначенні коефіцієнтів рівнянь, граничних і початкових умов, похибок обчислень [5]. У цій роботі пропонується використати підходи нейронних мереж для зменшення обчислювальних витрат у процесі пошуку розв'язку гідродинамічної задачі. Сьогодні одним з найбільш поширених типів нейронних мереж, які використовуються для моделювання залежностей та розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних, є нейронні мережі, засновані на радіально-базисних функціях, або радіально-базисні нейронні мережі (RBF-мережі) [6]. Важливою особливістю радіально-базисних нейронних мереж є простий алгоритм навчання. Формування оптимальної структури мережі виявляється природним етапом процесу навчання — за наявності тільки одного прихованого шару і тісного зв'язку активності нейрона з відповідною областю простору навчальних даних точка навчання виявляється набагато ближче до оптимального рішення, ніж це має місце в багатошарових мережах.

Мета статті (постановка завдання)

Прикладні задачі сучасної гідродинаміки та аеродинаміки включають у себе розрахунки течій в околі складних за конфігурацією об’єктів (літак, підводний човен, двигун, компресор, турбіна, геологічні утворення, гідротехнічні об’єкти тощо). Розв’язання таких задач потребує використання складних за конфігурацією розрахункових сіток великої розмірності, із змінною густиною.

Сучасною тенденцією є використання адаптивних сіток, що змінюються в ході уточнення розв’язку задачі. Актуальною проблемою при цьому є значний обсяг розрахунків при чисельному розв’язанні гідродинамічних задач. Пропонується розв’язання цієї проблеми шляхом застосування методів машинного навчання, зокрема нейромережевих методів, які дозволять спрогнозувати вигляд наближень та підібрати таку форму подання задачі, у якій процес розв’язання буде більш ефективним з погляду обсягу обчислень. Це потребує розвитку теоретичного підходу, знаходження відповідних типів та архітектур нейронних мереж, розвитку та застосування відповідного математичного апарату.

Виклад основного матеріалу

Використовувані у сучасній практиці чисельні методи розв’язання систем рівнянь, породжених задачами гідродинаміки носять ітераційний характер. У просторі параметрів, які відповідають значенням шуканих функцій у точках обчислювальної сітки, обирається певне початкове наближення та обчислюється цільова функція, яка являє міру відповідності даного наближеного розв’язку умові оптимальності або умові закінчення процесу. Далі, за певним алгоритмом знаходимо тензор поправок і визначаємо таке наближення, після чого процес повторюється, аж доки умову закінчення не буде виконано. Обсяг обчислень знаходиться у степеневій або експоненційній залежності від кількості точок сітки. Для сучасних інженерних задач обсяг обчислювальної роботи досить значний і може потребувати тривалої роботи обчислювального кластера. Значно зменшити обсяг обчислень вдалося б за рахунок вдалого вибору початкового наближення. З погляду методів машинного навчання, ця задача може бути подана як комплекс задач класифікації та регресії (прогнозування).

Як приклад розглянемо задачу про плоский рух рідини у обмеженому об’ємі (перетин труби тощо). Граничні умови біля стінок труби задають значення компонентів швидкостей руху середовища v_x, v_y, а граничні умови на відкритих ділянках можуть задавати значення тиску p (тиск у вхідному та вихідному перерізах моделі). Вектор невідомих величин складається із значень функцій $f(i,j)=v_{x\,i.j}$, $g(i,j)=v_{y\,i.j}$, $h(i,j)=p_{i,j}$ в точках, де вони не визначені граничними умовами. У всіх внутрішніх точках області значення функцій v_x, v_y, p невідомі. Також частина значень невідома і у граничних точках. У більшості випадків, звичайні математичні алгоритмів інтерполяції не можуть бути застосовані для знаходження початкового наближення, оскільки для цього недостатньо даних і необхідно робити додаткові припущення. Використовуючи в якості бази зразків ряд задач з відомими розв’язками, початкове наближення можна визначити одним з таких способів.

1. Найпростіший спосіб — обрати як початкове наближення один з множини наперед заданих зразків розподілів швидкостей і тисків, який найбільше підходить до заданих граничних умов. Тобто, розв’язати задачу класифікації, метою якої буде віднести об’єкт, описаний заданими граничними умовами, до одного з класів.

2. Знайти лінійну комбінацію наперед заданих зразків розподілів швидкостей і тисків, які в якості початкового наближення найбільш відповідають граничним умовам (комбінована задача класифікації і регресії).

3. Знайти таке перетворення простору, за якого один з наперед заданих зразків перейде у необхідне наближення.

У випадку двовимірних розрахунків задачу визначення такого перетворення можна формально поставити як задачу визначення гладкої функції $\beta=\beta(\alpha)$, де α та β — кути азимутів на прообраз точки границі розрахункової області та відповідний її образ, отриманий в результаті застосування перетворення (рис. 1).

Додатковим параметром перетворення може бути розташування центральної точки образу. Для тривимірного випадку необхідно визначити аналогічну гладку векторну функцію $\vec{\beta}=\vec{\beta}(\vec{\alpha})$, де компонентами векторів $\vec{\alpha}$ та $\vec{\beta}$ є сукупність кутових величин (наприклад, кути Ейлера), що визначають просторові азимутальні напрямки на точку–прообраз та точку–образ у тривимірному просторі.

Моделювання функції перетворення можна виконати за допомогою комбінованої інтелектуальної системи на основі нейромережевого підходу, узагальнена архітектура якої подана на рис. 2.

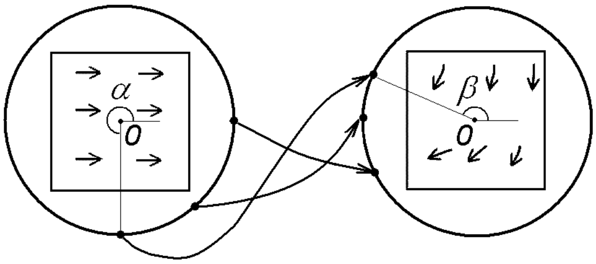

Рис. 1. Приклад нелінійного перетворення площини двовимірної задачі, що відображає один із зразків течії, наявний у базі даних, у зразок, що відповідає пред'явленим граничним умовам.

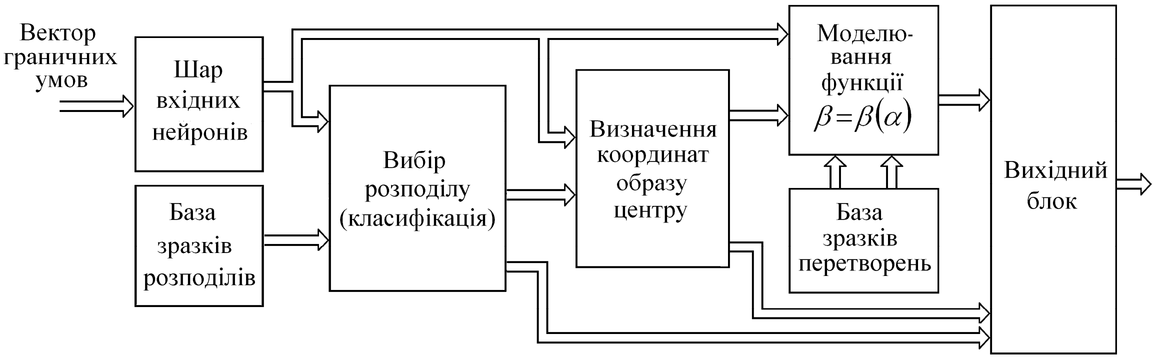

Рис. 2. Архітектура інтелектуальної системи для визначення початкового наближення чисельного розв'язку гідродинамічної задачі

Для моделювання функції перетворення використаємо радіально-базисну нейронну мережу. Роботу i-го нейрона RBF-шару можна описати формулою

$$f_i(\mathbf{X}) = \varphi\|\mathbf{X}-\mathbf{C}_i\|,$$

де $\mathbf{C}_i$ — вектор центру активаційної радіально-базисної функції нейрона; $\mathbf{X}, \mathbf{C}_i \in R^n$.

Вхідний вектор і вектор центру мають однакову розмірність. Як радіально-базисну функцію можна використати функцію Гауса

$$\varphi(\|\mathbf{X}-\mathbf{C}_i\|) = \exp\left(\frac{\|\mathbf{X}-\mathbf{C}_i\|^2}{2\sigma^2}\right),$$

де σ — ширина «вікна» активаційної функції.

Таким чином, i-й нейрон прихованого шару визначає подібність між вхідним вектором $\mathbf{X}$ і еталонним вектором $\mathbf{C}_i$. Функція активації RBF-нейрона приймає в такому випадку великі значення. Метрика може бути визначена як евклідова відстань

$$\|\mathbf{X}-\mathbf{C}_i\| = \sqrt{(x_1-c_{i1})^2+(x_2-c_{i2})^2+...+(x_n-c_{in})^2}.$$

При цьому нейрони вихідного шару мають лінійну активаційну функцію і виконують зважене підсумовування сигналів, що генеруються нейронами робочого шару:

$$y_j = \sum_{i=1}^{n} w_{ij} f_i(\mathbf{X}),\ j=\overline{1,k}.$$

У даному випадку всі ваги радіально-базисного шару можна взяти рівними. Кількість робочих нейронів обирається у відповідності до кількості навчальних зразків. Потрібно знайти вагові коефіцієнти $\mathbf{W}$ такі, щоб для кожного вхідного вектора з навчального набору

$$\{(\mathbf{X}_1, y_1), (\mathbf{X}_2, y_2), ..., (\mathbf{X}_n, y_n)\},$$

де $\mathbf{X}_i = \{x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{ik}\}$, виконувалася б вимога $h(\mathbf{X}_i) = y_i$.

Для першого вхідного вектора з навчального набору можна записати:

$$h(x_1) = \sum_{i=1}^{n} w_i f_i(X_1) =$$
$$= w_1 f_1(X_1) + w_2 f_2(X_1) + ... + w_n f_n(X_1).$$

Записуючи аналогічні співвідношення для всіх n вхідних векторів, отримуємо таку систему співвідношень, які мають виконуватися при успішному налаштуванні мережі вибором ваг $\mathbf{W}$:

$$\begin{vmatrix} f_i(X_1) & f_2(X_1) & \cdots & f_n(X_1) \\ f_i(X_2) & f_2(X_2) & \cdots & f_n(X_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_i(X_n) & f_2(X_n) & \cdots & f_n(X_n) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Або, у матричному вигляді:

$$\mathbf{F}\,\mathbf{W}=\mathbf{Y}\,,$$

звідки

$$\mathbf{W}=\mathbf{F}^{-1}\mathbf{Y}\,. \qquad (2)$$

Аналогічний результат може бути отриманий і при довільній кількості нейронів вихідного шару RBF-мережі.

Нехай вихідний шар містить p нейронів, тоді вектор значень виходу має вигляд

$$\mathbf{Y}_i=\left[y_{i1}, y_{i2}, ..., y_{ip}\right]^T$$

Ваги нейронів вихідного шару в цьому разі утворять матрицю $\mathbf{W}=\{w_{ij}\}, i=\overline{1,n}, j=\overline{1,p}$, а рівняння, аналогічне до рівняння (1), матиме такий вигляд:

$$\begin{vmatrix} f_i(X_1) & f_2(X_1) & \cdots & f_n(X_1) \\ f_i(X_2) & f_2(X_2) & \cdots & f_n(X_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_i(X_n) & f_2(X_n) & \cdots & f_n(X_n) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1p} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{n1} & w_{n2} & \cdots & w_{np} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1p} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{np} \end{vmatrix}.$$

Набори коефіцієнтів у рядках матриці $\mathbf{Y}$ описують виходи нейронів вихідного шару мережі для кожного вхідного вектора. Матриця ваг $\mathbf{W}$ і в цьому випадку може бути розрахована за формулою (2).

Формула (2) дозволяє розрахувати ваги RBF-мережі при кількості нейронів прихованого шару, що дорівнює кількості навчальних зразків. У практичних задачах кількість навчальних зразків може бути великою, і використовувати таку кількість нейронів прихованого шару може бути неприйнятно. У такому разі, беремо кількість нейронів прихованого шару меншу, за кількість навчальних зразків, і знаходимо наближений розв'язок задачі апроксимації. Задача знаходження оптимальних значень ваг у цьому випадку може розглядатися як задача мінімізації цільової функції, яка описує помилку виходу мережі. Для оптимального вибору коефіцієнтів RBF-мережі може бути використаний метод найменших квадратів.

Для пошуку наступного наближення розв'язку гідродинамічної задачі пропонується побудувати нейронну мережу на основі узагальнення принципу, який раніше був запропонований для пошуку рішень одновимірних диференціальних рівнянь [7; 8]. Пропонована нейронна мережа для пошуку розв'язку гідродинамічної задачі реалізує деяку вектор-функцію $\mathbf{T}(x, y, \mathbf{B}, \mathbf{W})$, аргументами якої є координати x, y, вектор вхідних величин $\mathbf{B}$ (граничні умови). Крім того, функція додатково залежить від деякого вектора дійсних параметрів $\mathbf{W}$. Значення вектор-функції $\mathbf{T}$ в точках розрахункової сітки представляють компоненти шуканих матриць або тензорів, які задають поля швидкостей і тисків рідкого середовища. Роль вектора вхідних величин $\mathbf{B}$ відіграють граничні умови, роль параметрів — вагові коефіцієнти мережі $\{w_i\}$.

За рахунок використання гладких функцій активації нейронів можна домогтися гладкості даної вектор-функції, і в такому випадку можна визначити частинні похідні вихідних величин мережі за вхідними величинами

$$\partial\mathbf{T}/\partial x\,,\ \partial\mathbf{T}/\partial y\,,\ \partial^2\mathbf{T}/\partial x^2\,,\ \partial^2\mathbf{T}/\partial y^2\,,\ \partial^2\mathbf{T}/\partial x\partial y\,,$$

що зрештою дозволить переписати систему рівнянь Нав'є–Стокса та записати її нев'язку E через похідні функції $\mathbf{T}(x, y, \mathbf{B}, \mathbf{W})$:

$$E=E_{\mathbf{T}}(x, y, \mathbf{B}, \mathbf{W}),$$

де індекс «$\mathbf{T}$» відображає залежність нев'язки від цієї функції.

Нев'язка буде залежати від параметрів мережі $\mathbf{W}$ і конкретної точки (x, y). Тепер задача знаходження рішення рівнянь руху рідини зводиться до задачі знаходження параметрів нейронної мережі, за яких нев'язка у всіх точках буде дорівнювати нулю. Для спрощення пошуку використаємо загальну міру нев'язки задачі:

$$E_s=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}\left|E_{\mathbf{T}}(x_i, y_j, \mathbf{B}, \mathbf{W})\right|.$$

Тепер необхідно знайти такий вектор параметрів нейронної мережі, за яких уведена міра нев'язки дорівнює нулю. Оберемо деякі початкові ваги $\mathbf{W}=\mathbf{W}_0$ і побудуємо процедуру зменшення помилки, яку будемо продовжувати, поки не отримаємо прийнятну точність: Наприклад, з використанням методу градієнтного спуску ця процедура виглядатиме так: обираємо початкові ваги мережі $\mathbf{W}=\mathbf{W}_0$ і на кожному кроці застосовуємо перетворення:

$$\gamma_n:\quad \mathbf{W}_{n+1}=\mathbf{W}_n-\gamma_n\frac{\partial E_s}{\partial\mathbf{W}}\quad,\ E_s\to\min\,,$$

Градієнтні методи пошуку, які традиційно прийнято застосовувати при налаштуванні нейронних мереж, у даному випадку можуть не дати прийнятних результатів через дві особливості, наявні у систем рівнянь, породжених гідродинамічними задачами: через велику розмірність задачі, і через те, що градієнтні методи погано працюють в умовах, коли є великий розкид значень градієнтів за різними координатами. Тому при пошуку наступного наближення, важливим є визначення ефективної стратегії пошуку на основі зондуючих ходів. Для цього може бути використана або система, попередньо навчена на модельних прикладах, або система, що навчається на основі підкріплення.

Метод навчання з підкріпленням добре пристосований для задач, які включають компроміс між довготерміновою та короткотерміновою винагородою. Саме така ситуація спостерігається при чисельному розв'язанні гідродинамічної задачі на багатопроцесорній системі або обчислювальному кластері. Сферою відповідальності кожного з процесорів при цьому є окремий блок обчислювальної сітки. При цьому алгоритм керування повинен обрати компроміс між отриманням підкріплення за рахунок знаходження локального розв'язку і врахуванням впливів знайденого розв'язку на сусідні блоки та їх цільові функції. При цьому пропускна здатність каналів зв'язку із сусідніми процесорами обмежена, також обмежені можливості даного процесора аналізувати деталі роботи сусідів.

Ситуацію можна описувати як марковську гру з багатьма гравцями [9], параметрами якої є набір станів S_i для кожного i-го гравця, $i = 1..N$ (значення компонентів шуканих матриць або тензорів, що складають поточне наближення у зоні відповідальності кожного з обчислювальних процесорів); функції спостереження $O_i : S_1 \times ... \times S_N \to R^d$, що задають d-вимірні картини спостереження для кожного з гравців, набори можливих дій для кожного з гравців A_i, функції підкріплення для кожного з гравців $r_i : S_i \times A_1 \times ... \times A_N \to R$. Гравець обирає свої дії (стратегію): $\pi_i : O_i \to \Delta(A_i)$. Пропонується замінити одну загальну нейронну мережу сукупністю нейронних мереж, що взаємодіють між собою. У праці [10] запропоновано підходи до визначення стратегій гравців у кооперативних іграх, які можуть бути при цьому використані.

Для узгодження роботи блочних мереж можна застосувати підхід, що полягає у поперемінному застосуванні мереж окремих блоків для уточнення розв'язку в рамках блоку, на першому кроці, та узгодження їх роботи на другому кроці. Для узгодження можна застосувати додаткову контролюючу мережу. Може бути також застосований підхід блоків, що частково перекриваються, при цьому після кожного циклу пошуку розв'язку блоки-сусіди усереднюють значення знайдених наближень у точках спільних областей. Точки обміну можуть бути постійними або обиратися випадково.

У процесі чисельного розв'язання гідродинамічної задачі систему рівнянь Нав'є–Стокса у частинних похідних зводять до системи n лінійних алгебричних (різницевих) рівнянь

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B},$$

де $\mathbf{A}$ — відома квадратна матриця $n \times n$ з дійсними постійними елементами; $\mathbf{B}$ — відомий постійний вектор з дійсними елементами розмірності n; $\mathbf{X}$ — вектор з дійсними компонентами (вектор розв'язків) розмірності n.

Будемо розглядати розповсюджену гідродинамічну апроксимацію, у якій потік рідини, що не стискається, описується системою рівнянь у частинних похідних не вище другого порядку.

У випадку прямокутної сітки, зорієнтованої за осями декартової системи координат задачі, такий перехід виконується досить просто з використанням для наближення похідних різницями послідовних, лінійно розташованих вузлів сітки, наприклад:

$$\Delta_{1x}(x_0, y_0) = \frac{f(x_0 + h_x, y_0) - f(x_0, y_0)}{h_x}; \qquad (3)$$

$$\Delta_{1y}(x_0, y_0) = \frac{f(x_0, y_0 + h_y) - f(x_0, y_0)}{h_y}; \qquad (4)$$

$$\Delta_{2xx}(x_0, y_0) = \frac{\Delta_{1y}(x_0 + h_x, y_0) - \Delta_{1y}(x_0, y_0)}{h_x} = \frac{f(x_0 + 2h_x, y_0) - 2f(x_0 + h_x, y_0) + f(x_0, y_0)}{h_x^2}, \qquad (5)$$

і так далі, де f — функція, яку необхідно знайти; x_0; y_0 — координати точки — вузла сітки, у якій знаходимо різниці функції f, дискретно визначеної у вузлах; Δ_{1x}, Δ_{1y}, Δ_{2xx} — позначення перших та других різниць, h_x та h_y — кроки прямокутної сітки по координатах x та y відповідно.

Формули (3),(4) наведено для правосторонніх різниць на прямокутній сітці. Можуть бути використані більш компактні формули середніх різниць:

$$\Delta_{2xx}(x_0, y_0) = \frac{f(x_0 + h_x, y_0) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0 - h_x, y_0)}{h_x^2}, \qquad (6)$$

і т. ін.

Відповідно, для запису перших та других похідних функції у вузлі сітки по двох координатах достатньо використати значення функції у п'яти точках: (x_0, y_0), $(x_0 + h_x, y_0)$, $(x_0 - h_x, y_0)$, $(x_0, y_0 + h_y)$, $(x_0, y_0 - h_y)$.

У випадку криволінійної сітки має місце невідповідність між декартовими координатами та направляючими векторами сітки, тому похідні функцій за декартовими координатами не можуть бути обчислені за формулами на зразок (3)–(6) з використанням лише однієї або двох сусідніх точок. Розглянемо n точок непрямокутної сітки, сусідніх із даною точкою. В околі точки (x_0, y_0) запишемо розклад функції в степеневий ряд, коефіцієнти якого визначаються через похідні:

$$f(x,y)=f(x_0,y_0)+\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_0,y_0}(x-x_0)+$$
$$+\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{x_0,y_0}(y-y_0)+\frac{1}{2!}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x_0,y_0}(x-x_0)^2+$$
$$+\frac{1}{2!}\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{x_0,y_0}(y-y_0)^2+2\frac{1}{2!}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\right|_{x_0,y_0}(x-x_0)(y-y_0)+$$
$$\varepsilon\big(x_0,y_0,(x-x_0),(y-y_0)\big). \qquad (7)$$

Останній доданок суми (6) містить усі члени розкладу ступенів, вищих від другого. Записавши розклад (7) для точок (x_1, y_1), (x_2, y_2), … , (x_n, y_n), отримуємо систему рівнянь щодо перших та других похідних функції f, значення яких можна наближено виразити через шукані значення функції f та відомі координати точок, якщо $n \geq 5$ (якщо $n > 5$ отримуємо перевизначену систему).

Альтернативною можливістю є введення в точках сітки їх власних систем координат, прив’язаних до напрямків на оточуючі вузли, та обчислення похідних у цих координатах.

Висновки та перспективи подальших досліджень

Запропоновані застосування нейромережевих методів машинного навчання у процесі пошуку розв’язку гідродинамічних рівнянь, що дозволять спрогнозувати вигляд наближень та підібрати оптимальну форму подання задачі. Також запропоновано спосіб розв’язання систем рівнянь, породжених гідродинамічною задачею на непрямокутній сітці.

Запропоновані підходи, в перспективі, можуть надати значні виграші у обсязі обчислень, за рахунок зведення підзадач, що виникають на окремих етапах обчислень, до задач, уже розв’язаних раніше. Для досягнення цих результатів необхідно провести ґрунтовні дослідження за рядом напрямків, Серед них — питання формування бази зразків, знаходження компромісного співвідношення між обсягом даних цих баз та обсягом обчислювальної роботи для їх застосування; підходи до формування функцій підкріплення за умови, що точний розв’язок невідомий, питання формування стратегій гравців у кооперативних іграх, питання формалізації перетворень простору задачі, використання перетворення простору як інструменту гравця та узгодження цих перетворень у кооперативній грі (розв’язання задачі на кластері). Ще одним можливим напрямком досліджень є напрацювання підходів до ефективного формування динамічних обчислювальних сіток, що на кожному етапі обчислень надавали б прийнятний компроміс між поточною досягнутою загальною точністю наближення та описом особливих регіонів.

ЛІТЕРАТУРА

1. **Глазок О. М.** Розв’язання гідродинамічної задачі за методом багатоточкового пошуку у розподіленому обчислювальному середовищі/ О. М. Глазок, М. М. Квач // Проблеми інформатизації та управління: зб. наук. праць. — К. : НАУ. — 2015. — Вип. 4(52). — С. 9–16.

2. **Raschka S.**, Mirjalili V. Python Machine Learning: Machine Learning and Deep Learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow, 2nd ed. — Packt Publishing, 2017. — 622 p.

3. Combining machine learning with computational hydrodynamics for prediction of tidal surge inundation at estuarine ports / Jon French, Robert Mawdsley, Taku Fujiyama, Kamal Achuthanb // UITAM Symposium on Storm Surge Modelling and Forecasting Procedia: IUTAM No.25 (2017). — P. 28–35. doi:10.1016/j.piutam.2017.09.005.

4. **Weymouth G. D.,** Dick K. P. Physics-Based Learning Models for Ship Hydrodynamics // Journal of Ship Research, Vol. 57, no. 1 (March 1, 2013). — 1–12.

5. **. Alibakshi A.** Strategies to develop robust neural network models: prediction of flash point as a case study // Analytica Chimica Acta, 2018. — 34 p. doi:10.1016/j.aca.2018.05.015.

6. Advantages of Radial Basis Function Networks for Dynamic System Design / Hao Yu; T. Xie, S. Paszczynski; B. M. Wilamowski // IEEE Transactions on Industrial Electronics. Vol. 58, Issue 12, Dec. 2011. – P. 5438–5450. doi:10.1109/TIE.2011.2164773.

7. **Lagaris I. E.**, Likas A. and Fotiadis D .I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations // IEEE Transactions on Neural Networks, Sep. 1998. — Vol. 9, No. 5. — P. 987–1000.

8. **Яничкина Е. В.**, Горбаченко В. И. Решение эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных с использованием радиально-базисных нейронных сетей // Научная сессия МИФИ-2006. Нейроинформатика. Часть 3. Теория нейронных сетей. Применение нейронных сетей. Нейронные сети и когнитивные системы. — С. 15–21.

9. **Mahmoud S.**, Miles S., Luck M. Cooperation emergence under resource-constrained peer punishment // Proc. of the 2016 Int. Conf. on Autonomous Agents & Multiagent Systems. — P. 900–908.

10. **Vidhate D. A.**, Kulkarni P. Enhanced Cooperative Multiagent Learning Algorithms (ECMLA) using Reinforcement Learning // Int. Conference on Computing, Analytics and Security Trends (CAST). IEEE Xplorer, 2017. – P. 556–561.

Глазок О. М.

ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ГІДРОДИНАМІЧНИХ ЗАДАЧ З ВИКОРИСТАННЯМ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Запропоновано використання нейромережевого підходу в процесі пошуку рішення гідродинамічної задачі числовими методами. Розглянуто дві області можливого застосування технології нейронних мереж - вибір вихідного наближення до рішення та пошук наступного наближення. Щоб вибрати початкове наближення, пропонується вирішити об'єднане завдання класифікації та регресії на основі існуючої бази зразків розподілу та існуючої бази моделей космічних перетворень. Запропонована архітектура об'єднаної нейронної мережі, яка вирішує цю проблему.

Для пошуку перетворення проблемного простору запропоновано використання радіально-базисної нейронної мережі. Запропоновано математичний апарат для налаштування мережі з довільним числом нейронів вихідного шару. Пропонується прийняти число нейронів прихованого шару менше кількості зразків педагогічної трансформації та знайти приблизне рішення. Завдання пошуку оптимальних значень ваги в цьому випадку може розглядатися як завдання мінімізації цільової функції, яка описує помилку виведення мережі.

Запропоновано побудувати нейронну мережу для знаходження наступного наближення рішення гідродинамічної задачі на основі узагальнення запропонованого раніше принципу для рішення рішень одномірних диференціальних рівнянь.

Пошук наступного наближення у випадку вирішення завдання на багатопроцесорній системі представлений як гра з декількома гравцями, кожен з яких повинен знайти компроміс між місцевими та глобальними цілями пошуку. Запропоновано замінити одну загальну нейронну мережу на набір нейронних мереж, які взаємодіють один з одним. Запропоновані підходи можуть зменшити обсяги обчислень, необхідних для пошуку рішення.

Ключові слова: гідродинамічна задача; пошук розв'язку; чисельний метод; машинне навчання; нейронна мережа; радіально-базисна функція; навчання з підкріпленням.

Glazok Olexiy M.

NUMERICAL SOLVING OF HYDRODYNAMIC PROBLEMS USING MACHINE LEARNING METHODS

The use of the neural network approach in the process of finding a solution of a hydrodynamic problem by numerical methods is proposed. The two areas of possible application of the technology of neural networks are considered – the choice of initial approximation to the solution and the search for the next approximation. To select the initial approximation, it is proposed to solve the combined task of classification and regression based on the existing base of distributions samples and on the existing base of patterns of space transformations. An architecture of the combined neural network which solves this problem is proposed.

For finding the transformation of the problem space, the use of radial-basis neural network is proposed. The mathematical apparatus for tuning the network with arbitrary number of neurons of the output layer is proposed. It is proposed to take the number of hidden layer neurons less than the number of educational transformation samples and find an approximate solution. The task of finding the optimal weight values in this case can be considered as a task of minimization of the target function, which describes the network outputt error.

It is proposed to construct a neural network for finding the next approximation of a solution of a hydrodynamic problem based on a generalization of the principle previously proposed for solving solutions of one-dimensional differential equations.

Finding the next approximation in the case of solving a task on a multiprocessor system is presented as a game with multiple players, each of which must find a compromise between local and global search purposes. It is proposed to replace one common neural network with a set of neural networks that interact with each other. The proposed approaches can reduce the amount of computation needed to find a solution.

Keywords: hydrodynamic problem; search for a solution; numerical method; machine learning; neural network; reinforcement learning.

Глазок А. М.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Предложено использование подхода нейронной сети в процессе нахождения решения гидродинамической задачи численными методами. Рассматриваются две области возможного применения технологии нейронных сетей – выбор начального приближения к решению и поиск следующего приближения. Для выбора начального приближения предлагается решить комбинированную задачу классификации и регрессии на основе существующей базы выборок распределений и существующей базы моделей космических преобразований. Предложена архитектура объединенной нейронной сети, которая решает эту проблему.

Для нахождения трансформации проблемного пространства предлагается использование радиально-базисной нейронной сети. Предложен математический аппарат для настройки сети с произвольным числом нейронов выходного слоя. Предлагается взять количество нейронов скрытого слоя меньше, чем количество образцов образовательной трансформации, и найти приблизительное решение. Задача поиска оптимальных значений веса в этом случае может рассматриваться как задача минимизации целевой функции, которая описывает ошибку выходного сигнала сети.

Предлагается построить нейронную сеть для нахождения следующего приближения решения гидродинамической задачи, основанного на обобщении ранее предложенного принципа решения одномерных дифференциальных уравнений.

Поиск следующего приближения в случае решения задачи на многопроцессорной системе представляется как игра с несколькими игроками, каждая из которых должна найти компромисс между локальными и глобальными поисковыми целями. Предлагается заменить одну общую нейронную сеть набором нейронных сетей, которые взаимодействуют друг с другом. Предлагаемые подходы могут уменьшить объем вычислений, необходимых для нахождения решения.

Ключевые слова: гидродинамическая задача; поиск решения; численный метод; машинное обучение; нейронная сеть; обучение с подкреплением.

Стаття надійшла до редакції 29.05.2018 р.
Прийнято до друку 04.06.2018 р.
Рецензент — д-р техн. наук, проф. Литвиненко О. Є