УДК 519.65

Сэмплирование подынтегральной функции для нейросетевого интегрирования

В. В. Папоян[1, 2], **А. С. Айриян**[1, 2, 3], **О. А. Григорян**[1, 2, 3]

[1] *Лаборатория информационных технологий,*
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980
[2] *Национальная научная лаборатория им. А. Алиханяна (ЕрФИ),*
ул. братьев Алиханян, д. 2, Ереван, Армения, 0036
[3] *Государственный университет «Дубна»,*
ул. Университетская, д. 18, Дубна, Московская область, Россия, 141980

Email: `vlpapoyan@jinr.ru`, `ayriyan@jinr.ru`

В настоящей работе исследуется применение алгоритма Метрополиса-Гастингса при формировании обучающей выборки для нейросетевой аппроксимации подынтегральной функции и его влияние на точность вычисления значения интеграла. Предложен гибридный способ формирования обучающего множества, в рамках которого часть выборки генерируется посредством применения алгоритма Метрополиса-Гастингса, а другая часть включает в себя узлы равномерной сетки. Численные эксперименты показывают, что при интегрировании в областях больших размерностей предложенный способ является более эффективным относительно применения равномерной сетки.

Ключевые слова: нейронная сеть, приближенное интегрирование, алгоритм Метрополиса-Гастингса

1. Введение

В рамках текущего исследования изучается задача приближенного вычисления интеграла для заданной непрерывной действительной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ по области S в виде

$$I[f] = \int_S f(x)dx,$$

где S – это выпуклое, ограниченное множество в $\mathbb{R}^n$.

Согласно универсальной теореме аппроксимации [1] и теореме 2 из работы [2]: любая выше определенная функция $f(x)$ может быть аппроксимирована сколь угодно точно посредством однослойной нейронной сети $\widehat{f}(x)$ с логистической сигмоидальной функцией активации так, что эта сеть может быть проинтегрирована аналитически в ограниченной, выпуклой области S.

Основная трудность, возникающая в рамках применения рассматриваемого подхода интегрирования заключается в обучении нейронной сети для аппроксимации подынтегральной функции. То есть в подборе матриц весовых коэффициентов при которых целевая функция достигала бы минимального значения. Успешное решение задачи обучения с учителем зависит от множества факторов, одним из существенных является формирование обучающей выборки. Обучающее множество $D = \{(x, f(x)) \mid x \in S_N \subset \tilde{S}\}$ (S_N – N-элементное конечное подмножество $\tilde{S}$) включает в себя вектор аргумента x и соответствующие значения функции $f(x)$. Другими словами, обучающее множество является результатом сэмплирования подынтегральной функции. В работе [2], в качестве обучающей выборки используются узлы равномерной сетки, что для семейств подынтегральных функций с сильными изменениями значений в некоторых подобластях приводит к недостаточно точной аппроксимации, следовательно и к неудовлетворительному результату интегрирования. В частности, для сэмплирования, так называемой, функций с явно выраженным пиком, будет недостаточно информации в тех участках, в которых форма функции более изменчива. Данная параметрическая функиця взята из набора функций для тестирования алгоритмов многомерного интегрирования, составленного Аланом Генцем [3].

В настоящем исследовании предлагается гибридный способ формирования обучающей выборки, в рамках которого часть обучающей выборки (с относительной долей объема выборки, обозначенной как ρ) генерируется посредством применения алгоритма Метрополиса-Гастингса [4, 5], который позволяет сэмплировать любую функцию распределения. Другая часть выборки состоит из узлов равномерной сетки. При $\rho = 0$ обучающая выборка состит только из узлов равномерной сетки, при $\rho = 1$ только из точек разыгранных алгоритмом Метрополиса-Гастингса.

2. Апробация метода

Оценка влияния доли числа точек, сгенерированных алгоритмом Метрополиса-Гастингса, на результат интегрирования осуществлялась эмпирическим путем. Программная реализация была произведена на языке Python. Численные эксперименты проводились в экосистеме ML/DL Гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT [6, 7].

Оценка точности интегрирования осуществляется с помощью определения количества правильных цифр приближенного значения интеграла, полученного посредством нейронной сети ($\hat{I}$):

$$CD(I, \hat{I}) = -\log_{10}\left|\frac{I - \hat{I}}{I}\right|.$$

Для функций с явно выраженным пиком применение предложенного способа задания обучающей выборки увеличивает точность интегрирования относительно обучения на узлах равномерной сетки, при любом количестве точек, сгенерированных алгоритмом Метрополиса-Гастингса (см. рис. 1). С другой стороны, значение ρ около 1 может ухудшать аппроксимацию функции из-за недостатка точек вблизи малых значений функций, тем самым уменьшить точность интегрирования. Стоит отметить, что при малом количестве точек ($N = 10^3$) и $n = 2$, с увеличением ρ возрастает точность интегрирования на 2 знака.

С увеличением значения N точность увеличивается практически для всех значений ρ, повторяя тенденцию изменения $CD(I, \hat{I})$. Важно отметить, что применение алгоритма Метрополиса-Гастингса для формирования обучающей выборки позволяет уменьшить вычислительные затраты. В частности, значение точности при $\rho = 0.8$ и $N = 10^3$ сравнимо с результатом при $\rho = 0$ и $N = 10^5$. Аналогичный вывод можно сделать, когда $n = 6$. Остается открытым вопрос, как выбрать оптимальное значение ρ.

3. Заключение

Интегрирование нейронной сетью представляется перспективным в некоторых классах задач, так как аналитическая формула ее интегрирования как функция от параметров области интегрирования позволяет хранить интегральную форму функции и аналитически вычислять приближенное значение в любой подобласти без необходимости повторного обучения сети. В данной работе было продемонстрировано, что сэмплирование с применением методов генерации точек по значению

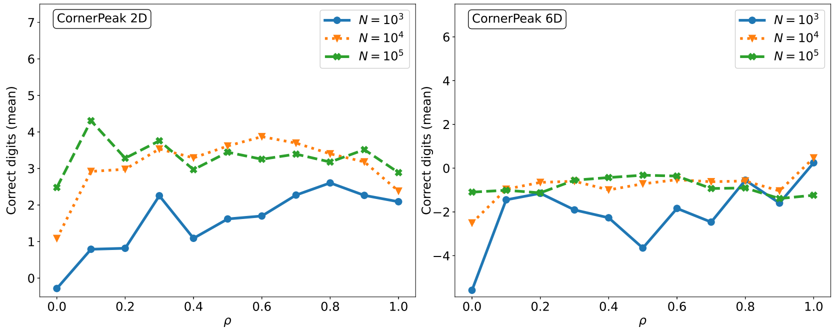

Рис. 1. Результаты апробации гибридного сэмплирования функций (слева для двух переменных, справа для 6-и). Каждая кривая – N. Каждая точка на графиках – это среднее значение 20-и приближенных интегралов при заданном ρ. Для больших значений $N = 10^5$ количество испытаний было сокращено до 5 из-за продолжительного времени обучения.

подынтегральных функций в сочетании с узлами равномерной сетки может позволить улучшить результат приближенного интегрирования нейронной сетью. Тем не менее выбор оптимальной доли первых точек ко второй в обучающей выборке остается открытым.

Литература

1. Cybenko G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function // Mathematics of Control, Signals, and Systems. — 1989. — Dec. — Vol. 2, no. 4. — P. 303–314. — Access mode: `https://doi.org/10.1007/bf02551274`.
2. Lloyd S., Irani R. A., Ahmadi M. Using Neural Networks for Fast Numerical Integration and Optimization // IEEE Access. — 2020. — Vol. 8. — P. 84519–84531. — Access mode: `https://doi.org/10.1109/access.2020.2991966`.
3. Genz A. A Package for Testing Multiple Integration Subroutines // Numerical Integration. — Springer Netherlands, 1987. — P. 337–340. — Access mode: `https://doi.org/10.1007/978-94-009-3889-2_33`.
4. Hastings W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // Biometrika. — 1970. — Apr. — Vol. 57, no. 1. — P. 97–109. — Access mode: `https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97`.
5. Chib S., Greenberg E. Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm // The American Statistician. — 1995. — Nov. — Vol. 49, no. 4. — P. 327. — Access mode: `https://doi.org/10.2307/2684568`.
6. Adam G. IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high-performance computing and training of IT-specialists // 8th International Conference “Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education” (GRID2018). — Vol. 2267 of CEUR Workshop Proceedings. — Aachen, 2013. — P. 638–644. — Access mode: `https://ceur-ws.org/Vol-2267/638-644-paper-122.pdf`.
7. Zuev M. I., Butenko Y., Ćosić M., Nechaevskiy A., Podgainy D., Rahmonov I., Stadnik A., Streltsova O. ML/DL/HPC Ecosystem of the HybriLIT Heterogeneous Platform (MLIT JINR): New Opportunities for Applied Research // Proceedings of Science. — 2022. — Vol. DLCP2022. — P. 027.

UDC 519.65

Sampling of Integrand for Integration Using Shallow Neural Network

V. V. Papoyan[1,2], **A. S. Ayriyan**[1,2,3], **H. A. Grigorian**[1,2,3]

[1] *Laboratory of Information Technologies*
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia
[2] *Alikhanyan National Science Laboratory (YerPhI)*
Alikhanyan Brothers, 2, Yerevan, Armenia, 0036
[3] *Dubna State University*
Universitetskaya ulitsa, 18, Dubna, Moscow region, 141980, Russia

Email: vlpapoyan@jinr.ru, ayriyan@jinr.ru

In this study, we explore the effect of using the Metropolis-Hastings algorithm for sampling the integrand on the accuracy of calculating the value of the integral. In addition, a hybrid method for sampling the integrand is proposed, in which part of the training sample is generated by applying the Metropolis-Hastings algorithm, and the other part includes points of a uniform grid. Numerical experiments show that when integrating in high-dimensional domains, sampling of integrands both by the Metropolis-Hastings algorithm and by a hybrid method is more efficient with respect to the use of a uniform grid.

Key words and phrases: neural network, numerical integration, Metropolis–Hastings algorithm