基于动力系统的神经网络几何结构研究

金鹏展

摘 要

深度神经网络在图像识别, 自然语言处理以及博弈等各领域取得了瞩目的成就. 近些年人们逐渐将目光转移至数学物理领域, 希望用深度学习技术进一步推动科学工程计算的发展, 与此同时, 也在考虑从数学与物理的角度来研究神经网络理论, 解释其强大的泛化能力. 特别地, 动力系统与深度神经网络有着密切的关系: 神经网络可看作是离散的动力系统, 每一步由一层线性变换及激活函数构成; 反之也可以通过 ODE 将神经网络一般化为连续模型.

在工业领域, 单纯的全连接神经网络无法达到所期望的泛化效果, 因为网络中缺乏具体问题的先验信息. 为此人们构造了卷积神经网络, 循环神经网络等, 将图像, 语言中的层次结构信息嵌入神经网络中, 在各式应用中取得了巨大的成功. 反观深度学习在数学物理中的应用, 基于直觉的网络模型有着很大的局限性. 很多物理问题中蕴涵的几何结构是非常清晰的, 而时下流行的常用网络结构无法有效地利用这些几何结构信息. 本文针对著名的保守动力系统, 哈密尔顿系统以及泊松系统, 提出了保结构神经网络, 即保持辛结构的辛网络 (SympNets) 以及保持泊松结构的泊松网络 (PNNs). 用保结构网络对相关保守系统作推演时, 因其保持真实系统的几何结构, 能够达到远超于非保结构模型的预测效果, 这与哈密尔顿系统辛几何算法所具备的优势是一致的. 区别于正向求解问题的传统辛算法, SympNets 与 PNNs 旨在从数据出发重构原系统的相流, 解决对应的反问题. 此外, 文中也给出了 SympNets (PNNs) 的基础逼近理论, 证明了其确实能够逼近任意辛映射 (泊松映射). 在构造辛网络的过程中, 衍生出了一个新的关于辛矩阵的基础问题: 辛矩阵是否可以分解为若干单位三角辛阵的乘积. 这个问题已在文中给出了答案, 任意一个辛矩阵都可以被分解为不超过 9 个单位三角辛阵的乘积. 这个分解定理进一步发展了辛矩阵的基础理论. 本文也通过单摆, 三体问题以及非线性薛定谔方程等数值实验展示了 SympNets 与 PNNs 的强大泛化能力.

关键字: 神经网络, 动力系统, 保结构, 几何结构, 辛矩阵