

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ К РЕШЕНИЮ ОБРАТНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ШТУРМА–ЛИУВИЛЛЯ

О.А. Козлов¹

¹Самарский университет, г. Самара
e-mail: oleg20030102@mail.ru

Аннотация

Работа посвящена применению методов машинного обучения для решения обратной спектральной задачи Штурма–Лиувилля. Используются три метода регрессии: k-ближайших соседей, случайного леса и многослойного перцептрона. Разработан программный комплекс на Python и MATLAB для генерации спектральных данных пяти классов потенциалов и их восстановления. Проведен вычислительный эксперимент, показавший высокую эффективность предложенного подхода.

Ключевые слова: обратная задача Штурма–Лиувилля, машинное обучение, k-ближайших соседей, случайный лес, многослойный перцептрон, генерация данных, Python, MATLAB, регрессия.

Введение

Обратные спектральные задачи заключаются в восстановлении операторов по некоторым их спектральным характеристикам. Такие задачи играют фундаментальную роль в различных разделах математики и имеют много приложений в механике, физике, электронике, геофизике, метеорологии и других областях естествознания и техники [1].

В отличие от классических численных методов, требующих значительных вычислительных затрат, методы машинного обучения позволяют строить быстрые прогнозные модели, выявляя скрытые закономерности в данных.

Настоящее исследование опирается на концепцию из работы [2] и существенно дополняет её за счёт расширенного эксперимента на пяти классах потенциалов, включая несимметричные случаи. Целью работы является применение методов машинного обучения к решению обратной задачи Штурма–Лиувилля и исследование эффективности такого подхода на расширенном наборе спектральных данных.

1. Постановка прямой и обратной задачи Штурма–Лиувилля

Рассмотрим уравнение Штурма–Лиувилля:

$$\ell y := -y'' + q(x)y = \lambda y, \quad x \in [0,1], \quad (1)$$

где потенциал $q(x)$ – вещественная функция из $C[0,1]$, λ – спектральный параметр. Если потенциал $q(x)$ на отрезке $(0,1)$ является симметричным, то есть $q(1-x) = q(x)$, и оператор Штурма–Лиувилля задан уравнением (1), при граничных условиях Неймана (2), то такой оператор однозначно восстанавливается по одному набору собственных значений по теореме Левинсона [1]. Несимметричный линейный потенциал $q(x) = b \cdot x$, исследуется для проверки обобщающей способности методов на несимметричные случаи.

Рассмотрен оператор Штурма-Лиувилля L , действующий по правилу $Ly = \ell y$. Область определения $D(L)$ состоит из функций $y \in C^2[0,1]$, удовлетворяющих граничным условиям Неймана:

$$y'(0) = 0, \quad y'(1) = 0. \quad (2)$$

Прямая задача Штурма-Лиувилля. По заданному потенциалу $q(x)$ и граничным условиям (2), найти собственные значения λ .

Обратная задача Штурма-Лиувилля. По заданным собственным значениям λ восстановить потенциал $q(x)$.

При численном решении обратных спектральных задач использовано конечное множество собственных значений $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$, где N – некоторое натуральное число.

2. Методы решения

Для численного решения прямой задачи применяется пакет MATSLISE в MATLAB [3]. Для решения обратной задачи используются три метода регрессии.

Метод k -ближайших соседей является непараметрическим методом, основанным на принципе локальности данных [4]. Для нового объекта x_q вычисляются евклидовы расстояния до всех объектов обучающей выборки [5]:

$$\rho(x_q, x_i) = \sqrt{\sum_{j=1}^m (x_{q,j} - x_{i,j})^2}, \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (3)$$

Прогнозируемое значение $\hat{y}_q$ вычисляется как среднее арифметическое целевых значений y_i ближайших k соседей, в работе $k = 3$:

$$\hat{y}_q = \frac{1}{k} \sum_{i \in \mathcal{N}_k(x_q)} y_i. \quad (4)$$

Метод случайного леса является ансамблевым методом, основанным на построении B решающих деревьев на бутстрэп-выборках, в работе $B = 100$ деревьев. Прогноз получается усреднением предсказаний всех деревьев [4]:

$$\hat{y}_q = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B T_b(x_q). \quad (5)$$

Метод многослойного перцептрона является параметрическим методом обучения с учителем. Многослойный перцептрон состоит из последовательности слоёв нейронов, соединённых полносвязными связями. Каждый слой преобразует выход предыдущего слоя по правилу [5]:

$$z_q^{[l]} = W^{[l]} a_q^{[l-1]} + b^{[l]}, \quad a_q^{[l]} = g^{[l]}(z_q^{[l]}), \quad (6)$$

Обучение заключается в минимизации среднеквадратичной ошибки с L2-регуляризацией (коэффициент $\lambda = 2 \cdot 10^{-4}$) с помощью оптимизатора Adam. Архитектура включает два скрытых слоя (10 и 30 нейронов) с функцией активации ReLU. Для предотвращения переобучения применяется ранняя остановка (patience = 50 эпох) по значению среднеквадратичной ошибки на валидационной выборке.

3. Вычислительный эксперимент

3.1. Классы потенциалов и параметры эксперимента

В рамках эксперимента рассматриваются следующие пять классов потенциалов:

1. Параболический потенциал: $b \cdot (x - 0,5)^2$, симметричный.

2. Линейный потенциал: $b \cdot x$, несимметричный.
3. Периодический потенциал: $b \cdot \cos(2\pi x)$ симметричный.
4. Двухъямный потенциал: $b \cdot (x - 0,3)^2 \cdot (x - 0,7)^2$, симметричный.
5. Экспоненциальный потенциал: $b \cdot e^{-10(x-0,5)^2}$, симметричный.

Для каждого класса генерируется 1001 образец. Входные признаки – первые 5 собственных значений. Целевая переменная – значения потенциала в 21 точке на $[0, 1]$.

Генерация данных выполняется в MATLAB с использованием пакета `matslise` с точностью 10^{-12} . Данные разделяются на обучающую (70%), валидационную (10%) и тестовую (20%) выборки. Входные признаки стандартизируются. Гиперпараметры моделей фиксированы для всех классов.

3.2. Результаты

Для оценки качества восстановления использованы коэффициент детерминации R^2 и среднеквадратичная ошибка RMSE. Для оценки устойчивости результатов и исключения влияния случайного разбиения проведена 5-кратная перекрёстная проверка на обучающей выборке. Итоговая оценка вычисляется как среднее значение R^2 по всем блокам. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1 – R^2 на тестовой выборке и при 5-кратной кросс-валидации

Потенциал	k-NN R^2	k-NN CV R^2	RF R^2	RF CV R^2	MLP R^2	MLP CV R^2
Параболический	0,999990	0,999988	0,999996	0,999994	0,952376	0,952363
Линейный	0,999990	0,999987	0,999995	0,999993	0,952380	0,952380
Периодический	0,999991	0,999988	0,999994	0,999992	0,904761	0,904760
Двухъямный	0,999991	0,999988	0,999996	0,999994	0,904656	0,904377
Экспоненц.	0,999989	0,999987	0,999995	0,999993	0,999998	0,999998

Стандартное отклонение R^2 по всем блокам не превышает $2 \cdot 10^{-4}$, что подтверждает высокую устойчивость оценок.

Для проверки устойчивости методов к погрешностям измерений в собственные значения тестовой выборки вводился мультипликативный гауссовский шум:

$$\tilde{\lambda}_n = \lambda_n \cdot (1 + \varepsilon \cdot \xi), \quad \xi \sim N(0,1), \quad \varepsilon \in \{0,001; 0,005; 0,01\}. \quad (7)$$

Среднее R^2 по всем пяти классам представлено в таблице 2.

Таблица 2 – Среднее R^2 при зашумлении собственных значений

ε	k-NN	Random Forest	MLP
0,000	0,999990	0,999995	0,942834
0,001	0,931313	0,992566	0,889271
0,005	0,700337	0,965072	0,125628
0,010	0,445677	0,933988	-2,124261

Все приведённые метрики получены на синтетических данных с контролируемой генерацией потенциалов. Перенос результатов на реальные спектральные данные требует отдельной верификации.

Заключение

Методы k-NN и случайного леса показали наивысшую обобщающую способность, а MLP обеспечил наименьшую среднеквадратичную ошибку. Результаты 5-кратной кросс-валидации подтверждают устойчивость и воспроизводимость полученных оценок вне зависимости от конкретного разбиения данных.

Анализ устойчивости к шуму выявил, что случайный лес наиболее надёжен в условиях зашумлённых данных, тогда как k-NN и MLP чувствительны к возмущениям для потенциалов со сложной спектральной структурой. Подтверждена способность методов машинного обучения к обобщению на различные классы потенциалов, включая несимметричный случай. Разработанный программный комплекс может быть использован для быстрого восстановления потенциалов по спектральным данным. Эффективность методов для несимметричных потенциалов, восстановление которых требует двух независимых наборов собственных значений, соответствующих краевым условиям Неймана и Дирихле, остаётся предметом дальнейшего изучения. Перспективным представляется также оптимизация гиперпараметров с подбором индивидуальной архитектуры для каждого класса потенциалов, а также параллельное обучение моделей для расширения охвата эксперимента.

Список использованных источников

1. Юрко, В. А. Введение в теорию обратных спектральных задач / В. А. Юрко. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 384 с.
2. Pallikarakis, N. Application of machine learning regression models to inverse eigenvalue problems / N. Pallikarakis, A. Ntargaras // *Computers and Mathematics with Applications*. – 2024. – P. 163–174.
3. Regression in machine learning. – URL: <https://www.geeksforgeeks.org/machine-learning/regression-in-machine-learning/> (дата обращения: 04.10.2025).
4. Tibshirani, R. The Elements of Statistical Learning: Data Mining / R. Tibshirani, T. Hastie, J. Friedman. – Wiley-Blackwell, 2010. – P. 660–705.
5. Murphy, K. P. Machine Learning: A Probabilistic Perspective / K. P. Murphy. – The MIT Press, 2012. – P. 473–506.

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS TO SOLVING INVERSE SPECTRAL PROBLEMS OF STURM–LIOUVILLE

O.A. Kozlov¹

¹*Samara University, Samara*
e-mail: oleg20030102@mail.ru

Abstract

The paper is devoted to the application of machine learning methods for solving the inverse Sturm–Liouville spectral problem. Three regression methods are employed: k-nearest neighbors, random forest, and multilayer perceptron. A software complex in Python and MATLAB has been developed for generating spectral data of five classes of potentials and their reconstruction. A computational experiment has been conducted, demonstrating high efficiency of the proposed approach.

Keywords: inverse Sturm–Liouville problem, machine learning, k-nearest neighbors, random forest, multilayer perceptron, data generation, Python, MATLAB, regression.