

Реализация гамильтоновой нейронной сети по статье <https://arxiv.org/pdf/1906.01563>.

1 Постановка задачи

Есть некоторая физическая система с неизвестной динамикой и набор измерений нескольких величин этой системы (обучающие данные). Необходимо реализовать нейронную сеть, которая предсказывает динамику системы по начальным данным и сохраняет заданную физическую величину.

Здесь будут использованы гамильтоновы нейронные сети, так как они хорошо предсказывают динамику системы, имеющую инвариантную величину. В нашем случае мы рассматриваем системы с постоянной полной энергией.

2 Основная идея

Гамильтониан \mathcal{H} (полная энергия системы) заменяем на нейросеть. Нейросеть будет обучаться предсказывать полную энергию системы, одно скалярное число. Чтобы полная энергия системы сохранялась, мы должны с ростом времени двигаться перпендикулярно росту гамильтониана (перпендикулярно градиенту полной энергии), то есть двигаться по линии уровня. Пусть (q, p) – координаты динамической системы, тогда для сохранения энергии выбираем двигаться в направлении:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \quad (1)$$

3 Обучение модели

Во время прямого прохода нейросеть использует набор координат и выдает одно скалярное значение, гамильтониан. Затем, перед вычислением потерь, вычисляем градиент гамильтониана относительно q, p . Именно с учетом этого градиента мы вычисляем и оптимизируем потери:

$$\mathcal{L}_{HNN} = \left\| \frac{\partial \mathcal{H}_\theta}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial t} \right\|_2 + \left\| \frac{\partial \mathcal{H}_\theta}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial t} \right\|_2 \quad (2)$$

4 Получение динамики системы

Обозначим $S = \left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt} \right) = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \right)$ выбранное направление движения системы. Дифференцируем обученный гамильтониан и получаем динамику на q, p . То есть по предыдущей точке находим следующую, численно интегрируя:

$$(q_1, p_1) = (q_0, p_0) + \int_{t_0}^{t_1} S(q, p) dt. \quad (3)$$

В итоге мы получаем обученную модель, которая по некоторым начальным данным предсказывает траекторию системы.

5 Реализация на примере: грузик на пружинке

5.1 Генерация данных

Координата грузика на пружинке

$$q = A \cos(wt + \phi), \quad (4)$$

где A – амплитуда, ϕ – фаза, $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$ – собственная частота, k – жёсткость пружины.

Импульс грузика на пружинке:

$$p = m\dot{q} = -mwA \sin(wt + \phi), \quad (5)$$

где m – масса грузика.

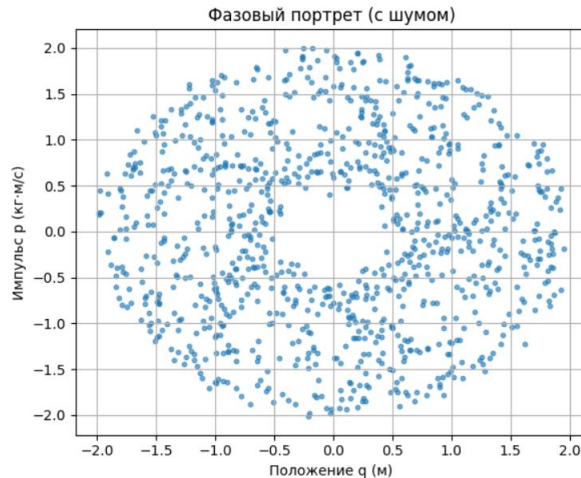


Рис. 1: Фазовый портрет точек траекторий системы.

Хотим сгенерировать 100 траекторий по 100 точек в каждой. Для этого из равномерного распределения выбираем 100 амплитуд и фаз, по ним находим 100 пар точек начальных данных (q_0, p_0) . Зная гамильтониан системы $H = \frac{1}{2}kq + \frac{p}{2m}$, находим вектор производной $\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right) = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\right)$. То есть у нас есть массив точек начальных данных и вектор производной в каждой точке. Далее численно решаем ОДУ методом Рунге-Кутты 4 порядка, получаем 100 траекторий по 100 точек со значением вектора производной $\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right)$ в каждой точке. Объединяем траектории в один массив и накладываем небольшой гауссовский шум. Если изобразить каждую десятую точку траектории, то получим фазовый портрет на рис. 1

Если изобразить траектории зашумленных данных, то получим рис. 2.

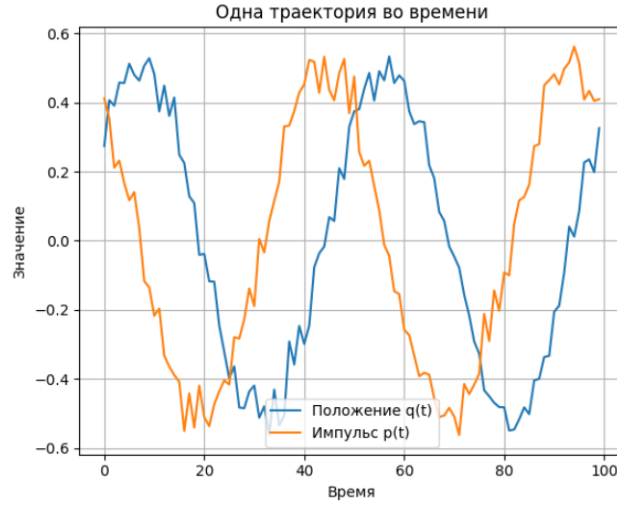


Рис. 2: Одна траектория движения системы во времени.

5.2 Результаты

Стартуем из начального положения $(1, 0)$. Предсказываем гамильтониан \mathcal{H} с помощью обученной нейросети. По гамильтониану находим производные $\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right) = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\right)$. Далее по текущей точке с помощью метода Эйлера находим следующую точку траектории. В течение 30 секунд записываем координаты, импульс и энергию.

Фазовый портрет динамики системы изображен на рис. 3.

Траектория движения груза на пружинке из начального положения в течение 30 секунд изображена на рис. 4.

Смещение энергии за 30 секунд составило 0.015029, что видно на рис. 5. Относительно начального положения смещение энергии составило 0.1473%.

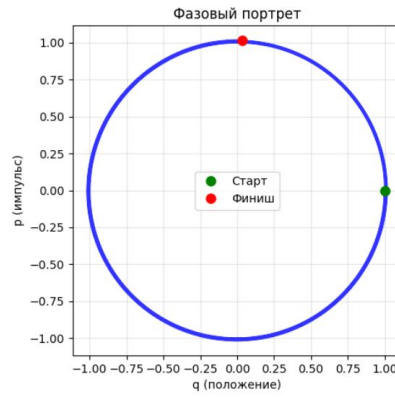


Рис. 3: Предсказанный фазовый портрет движения груза на пружинке из начального положения $(1, 0)$ в течение 30 секунд (пять оборотов).

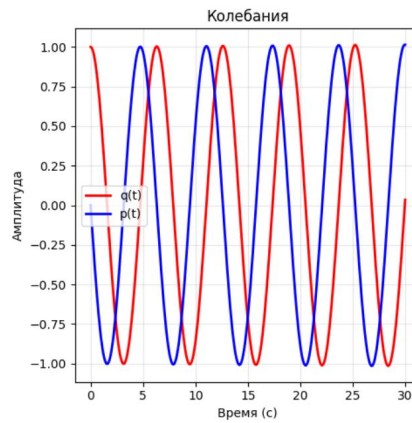


Рис. 4: Предсказанная траектория движения груза на пружинке из начального положения $(1, 0)$ в течение 30 секунд.

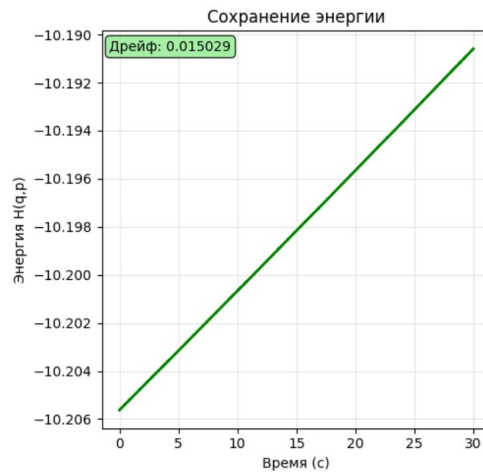


Рис. 5: Смещение полной энергии системы в течение 30 секнд.