Реализация гамильтоновой нейронной сети по статье "Hamiltonian Neural Networks" Sam Greydanus, Misko Dzamba, Jason Yosinski
`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 $\mathscr{H}$ (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:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q}. \tag{1}$$

3 Обучение модели

Во время прямого прохождения 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:

$$\mathscr{L}_{HNN} = \left\| \frac{\partial \mathscr{H}_\theta}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial t} \right\|_2 + \left\| \frac{\partial \mathscr{H}_\theta}{\partial q} + \frac{\partial p}{\partial t} \right\|_2 \tag{2}$$

4 Получение динамики системы

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

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

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

$$q = A\cos(wt + \phi), \tag{4}$$

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

Импульс грузика на пружинке:

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

где m – масса грузика.

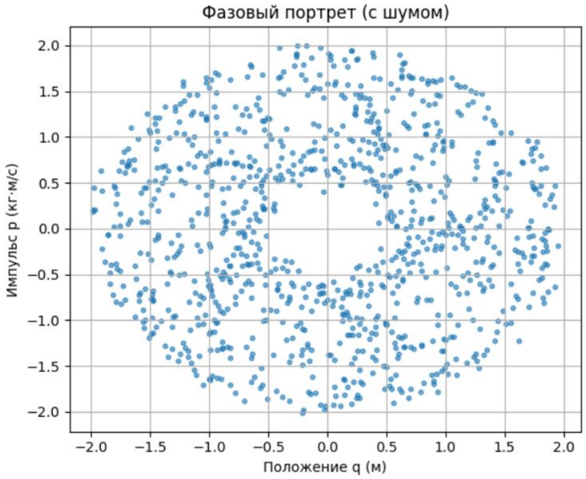

Рис. 1: Фазовый портрет точек траекторий системы.

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 $\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right) = \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p}, -\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial q}\right)$. То есть у нас есть массив точек начальных данных и вектор производной в каждой точке. Далее численно решаем ОДУ методом Рунге-Кутта 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 гауссовкий 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 $\mathscr{H}$ с помощью обученной нейросети. По гамильтониану находим производные $\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right) = \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{dp}, -\frac{\partial\mathscr{H}}{dq}\right)$. Далее по текущей точке с помощью метода Эйлера находим следующую точку траетории. В течение 30 секунд записываем координы, импульс и энергию.

Фазовый портрет динамики системы изображен на рис. 3.

Траектория движения грузика 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%.

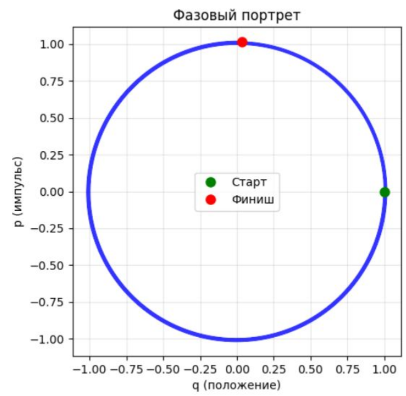

Рис. 3: Предсказанный фазовый портрет движения грузика на пружинке из начального положения $(1, 0)$ в течение 30 секунд (пять оборотов).

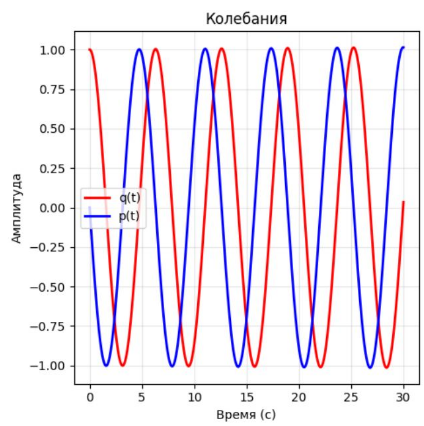

Рис. 4: Предсказанная траектория движения грузика на пружинке из начального положения $(1, 0)$ в течение 30 секунд.

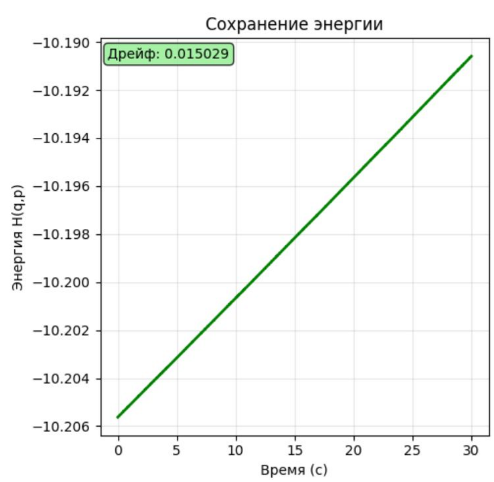

Рис. 5: Смещение полной энергии системы в течение 30 секнд.