

라그랑지안 신경망

마일스 크랜머 프린

스턴 대학교

mcranmer

@princeton.edu

샘 그레이다누스 오레

곤 주립대

greydanus.17

@gmail.com

스테판 호이어

구글 리서치

shoyer

@google.com

피터 바타글리아 딥

마인드 피터 바타글

리아

@google.com

데이비드 스페르겔* 플랫

아이언 인스티튜트 데이

비드스페르겔

플랫아이언 인스티튜트

셀리 호† 플랫 아

이언 인스티튜트

셀리호

플랫아이언 인스티튜트

초록

세계의 정확한 모델은 기본 대칭에 대한 개념을 바탕으로 구축됩니다. 물리학에서 이러한 대칭은 에너지와 운동량과 같은 보존 법칙에 해당합니다. 하지만 신경망 모델은 물리학에서 점점 더 많이 사용되고 있지만 이러한 대칭성을 학습하는데 어려움을 겪고 있습니다. 이 논문에서는 신경망을 사용하여 임의의 라그랑지안을 매개변수화할 수 있는 라그랑지안 신경망(LNN)을 제안합니다. 해밀턴을 학습하는 모델과 달리 LNN은 정식 좌표가 필요하지 않으므로 정식 모멘타를 알 수 없거나 계산하기 어려운 상황에서도 잘 작동합니다. 이전 접근 방식과 달리, 우리의 방법은 학습된 에너지의 함수 형태를 제한하지 않으며 다양한 작업을 위한 에너지 절약형 모델을 생성할 수 있습니다. 이중 진자와 상대론적 입자에 대한 접근법을 테스트하여 기존 접근법에서 소산이 발생하는 경우 에너지 보존을 입증하고 해밀턴 접근법이 실패하는 경우 정식 좌표 없이 상대론적 모델링을 수행합니다. 마지막으로 라그랑지안 그래프 네트워크를 사용하여 이 모델을 그래프와 연속 시스템에 적용하는 방법을 보여주고, 1D 파동 방정식으로 시연해봅니다.

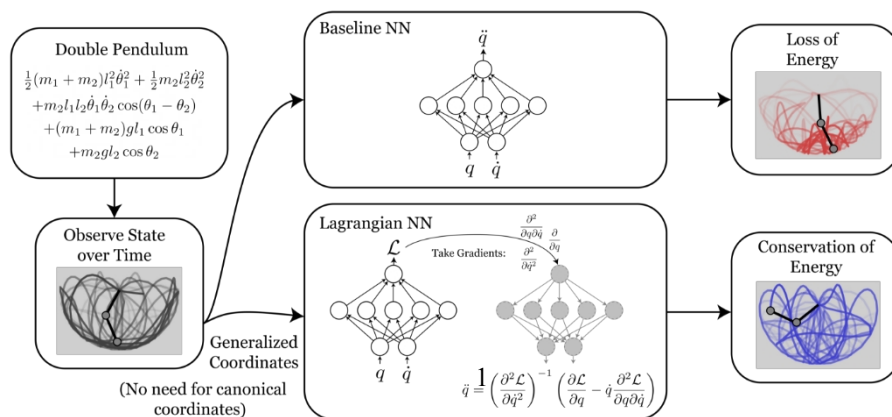


그림 1: 물리학자들은 이중 진자(검은색)와 같은 물리 시스템의 역학을 설명하기 위해 라그랑지안을 사용합니다. 신경망은 에너지를 보존하지 못하기 때문에 장기간에 걸쳐 이러한 동역학을 모델링하는 데 어려움을 겪습니다(빨간색). 이 논문에서는 신경망으로 임의의 라그랑지안을 학습하고, 학습된 동역학에 강력한 물리적 선함을 유도하는 방법을 보여줍니다(파란색).

^{*}프린스턴 대학교와도 제휴

[†]뉴욕대학교, 프린스턴대학교, 카네기멜론대학교와도 제휴하고 있습니다.

1 소개

신경망은 노이즈가 많은 고차원 데이터에서 패턴을 찾는 데 탁월합니다. 이미지 분류(Krizhevsky 외, 2012), 언어 번역(Sutskever 외, 2014), 게임 플레이(Silver 외, 2017)와 같은 작업에서 뛰어난 성능을 발휘할 수 있습니다. 이러한 성공의 일부는 하드코딩된 번역 불변성(예: 컨볼루션 필터), 영리한 아키텍처 선택(예: 자기 주의 레이어), 잘 조정된 최적화 환경(예: 배치 정규화)을 포함하는 "딥 프라이어"에 그 뿌리를 두고 있습니다. 그러나 이러한 모델은 어려운 작업에서 인간과 경쟁할 수 있는 능력에도 불구하고 물리적 세계의 역학에 대한 기본적인 직관이 많이 부족합니다. 인간은 위로 던진 공이 거의 같은 속도로 손으로 돌아올 것이라는 것을 빠르게 추론할 수 있지만, 신경망은 수천 개의 예제를 보고도 이러한 추상성을 이해하지 못할 수 있습니다(Bakhtin 외, 2019).

신경망 모델의 기본적인 문제는 기본적인 대칭과 보존 법칙을 학습하는 데 어려움을 겪는다는 것입니다. 이 문제에 대한 한 가지 해결책은 임의의 보존 법칙을 학습할 수 있는 신경망을 설계하는 것입니다. 이것이 바로 그레이다누스 외(2019)의 해밀턴 신경망과 토스 외(2019)의 해밀턴 생성 신경망의 핵심 동기입니다. 이 두 가지 유형은 신경망으로 모델링된 미분 방정식 또는 "신경 ODE"로, Chen 등(2018)에서 광범위하게 연구되었습니다.

하지만 이러한 모델은 효과적인 보존 법칙을 학습할 수 있었지만 해밀턴 형식주의에서는 시스템의 좌표가 "정식"이어야 합니다. 표준이 되려면 모델에 대한 입력 좌표(q, p)가 푸아송 괄호 관계에 의해 주어진 엄격한 규칙 집합을 따라야 합니다:

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial q_i} \Leftrightarrow \{q_i, q_j\} = 0 \quad \{p_i, p_j\} = 0 \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad (1)$$

$$\text{여기서 } \{f, g\} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i},$$

여기서 q_i 는 시간 도함수 \dot{q}_i 와 라그랑지안을 나타냅니다. 문제는 많은 데이터 세트가 이 제약 조건을 만족하지 않는 동적 좌표를 가지고 있다는 점입니다. 즉, p_i 는 많은 경우 단순히 \dot{q}_i 질량이 아니라는 것입니다. 유망한 대안은 시스템의 라그랑지안을 대신 학습하는 것입니다. 해밀턴과 마찬가지로 라그랑지안도 총 에너지 보존을 강제하지만, 해밀턴과 달리 임의의 좌표를 사용하여 이를 수행할 수 있습니다.

이 논문에서는 신경망을 사용해 라그랑지안을 학습하는 방법을 설명합니다. 이를 통해 해밀턴 신경망(HNN)이 모델링하지 못하는 복잡한 물리 시스템을 모델링할 수 있으며, 에너지 절약 측면에서 기존 신경망보다 뛰어난 성능을 발휘할 수 있음을 입증합니다. 저희는 라그랑지안 학습과 밀접한 관련이 있는 방법인 Lutter 외(2019)의 "심층 라그랑지안 네트워크"(DeLaN)의 맥락에서 저희의 연구를 논의합니다. 우리의 연구와 달리 DeLaN은 연속 제어 애플리케이션을 위해 구축되었으며 강제 동역학만 모델링합니다. 우리의 모델은 라그랑지안의 함수 형태를 제한하지 않는다는 점에서 더 일반적입니다. 또한 5장에서는 라그랑지안 그래프 네트워크를 사용하여 연속 시스템과 그래프에 모델을 적용하는 방법을 보여줍니다.

표 1: 물리 역학을 위한 신경망 기반 모델의 개요. 라그랑지안 신경망은 여러 가지 바람직한 특성을 결합합니다. DeLaN은 학습된 운동 에너지를 명시적으로 제한하고, HNN은 정식 모멘타의 정의를 요구함으로써 암시적으로도 제한합니다.

	신경망	신경 ODE	HNN	DeLaN	LNN(당사)
동적 시스템 모델링 가능	C	C	C	C	C
미분 방정식 학습		C	C	C	C
정확한 환경 보호법 알아보기			C	C	C
임의의 좌표에서 학습합니다.	C	C		C	C
임의의 라그랑지안 배우기					C

2 이론

라그랑지안. 라그랑주 형식주의는 한 상태 x_0 에서 시작하여 다른 상태 x_1 로 끝나는 좌표 $x_t = (q, \dot{q})$ 를 가진 고전 물리학 시스템을 모델링합니다.

좌표가 x_0 에서 x_1 로 이동할 수 있으며, 이러한 각 경로를 "액션"이라는 스칼라 값과 연결합니다. 라그랑지안 역학에 따르면 동작을 함수라고 하면 다음과 같습니다:

$$S = \int_{t_0}^{t_1} (T(q_t, \dot{q}_t) - V(q_t)) dt, \quad (2)$$

여기서 T 는 운동 에너지이고 V 는 위치 에너지라면 물리 시스템이 취할 수 있는 경로는 하나뿐이며, 그 경로는 S 의 정지(예: 최소) 값입니다. S 가 정지해야 한다는 조건, 즉 $\delta S = 0$ 을 강제하기 위해 라그랑지안을 $T - V$ 로 정의하고 시스템의 경로를 설명하는 *오일러-라그랑주 방정식*이라는 제약 방정식을 유도합니다:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} = \frac{\partial L}{\partial Q_j} \quad (3)$$

파라메트릭 라그랑지안과 오일러-라그랑주. 물리학자들은 전통적으로 오일러-라그랑주 방정식에 대한 해석식을 적고 이를 미분 방정식 체계로 기호적으로 확장합니다. 그러나 이제 블랙박스 되었기 때문에 오일러-라그랑주 방정식의 해석적 확장이 불가능하다는 사실을 인정해야 합니다. 다행히도 시스템의 동역학에 대한 수치 식은 여전히 도출할 수 있습니다. 먼저 오일러-라그랑주 방정식을 벡터화된 형태로 다음과 같이 다시 작성합니다.

$$\frac{d}{dt} \nabla_{\dot{q}} L = \nabla_q L \quad (4)$$

여기서 $(\nabla_{\dot{q}} \equiv \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i})$. 그런 다음 체인 규칙을 사용하여 시간 도함수를 확장할 수 있습니다. d/dt 를 통해

라그랑지안의 그래디언트를 사용하여 두 개의 새로운 항, 즉 \ddot{q} 와 \dot{q} 가 있는 항을 얻었습니다:

$$(\nabla_{\dot{q}} \nabla_{\dot{q}}^T L) \ddot{q} + (\nabla_{\dot{q}} \nabla_q L) \dot{q} = \nabla_q L. \quad (5)$$

여기서 ∇ 연산자의 이러한 곱은 행렬입니다(예: $(\nabla_{\dot{q}} \nabla_q L)_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial q_j}$). 이제

행렬을 역산하여 \ddot{q} 를 해결합

니다:

$$\ddot{q} = (\nabla_{\dot{q}} \nabla_{\dot{q}}^T L)^{-1} [\nabla_q L - (\nabla_{\dot{q}} \nabla_q^T L) \dot{q}]. \quad (6)$$

주어진 좌표 집합 $x_t = (q_t, \dot{q}_t)$ 에 대해 이제 블랙박스 라그랑지안으로부터 \ddot{q}_t 을 계산하는 방법을 갖게 되었으며, 이를 통합하여 시스템의 동역학을 구할 수 있습니다. 그레이다누스 외(2019)와 같은 방식으로, 우리는 또한 x^{true} 사이의 불일치 측면에서 손실 함수를 작성할 수 있습니다. L_t 및 x_t^{true} .

3 관련 작업

물리학 선행 연구. 신경망에 물리학에 기반한 귀납적 편향성을 부여하려는 다양한 선행 연구가 있었습니다. 여기에는 분자 역학(Rupp 외, 2012), 양자역학(Schütt 외, 2017), 로봇 공학(Gupta 외, 2019; Lutter 외, 2019)의 영역별 문제에 대한 연구가 포함됩니다. 물리적 상호작용을 그래프의 메시지 전달로 모델링하는 인터랙션 네트워크(Battaglia 외, 2016)와 같은 보다 일반적인 접근법도 있습니다.

불변량 학습. Greydanus 외(2019), Toth 외(2019), Chen 외(2019)의 최근 연구는 신경망으로 해밀

턴을 근사화하여 불변량을 학습하는 방법을 보여줌으로써 신경망에 물리적 전제를 부여하는 이전 접근법을 기반으로 합니다. 이 논문에서는 해밀턴이 아닌 라그랑지안을 학습하여 학습된 운동 에너지를 제한하지 않는 것을 목표로 Greydanus 등(2019)과 동일한 접근 방식을 따릅니다.

DeLaN. 이와 밀접하게 관련된 이전 연구로는 "심층 라그랑지안 네트워크" 또는 DeLaN(Lutter 외, 2019)이 있는데, 이 논문에서 저자들은 특정 유형의 라그랑지안 시스템을 학습하는 방법을 보여줍니다. 이들은 운동 에너지가 속도의 내적 곱이라고 가정합니다: $T = \dot{q}^T M \dot{q}$, 여기서 M 은 q 에 의존하는 양의 정적 행렬입니다. 이 접근 방식은 로봇 공학에서 접하는 많은 시스템을 포함하는 강체 동역학에 잘 작동합니다. 그러나 자기장 속의 하전 입자나 특수 상대성 이론에서 빠르게 움직이는 물체 등 많은 시스템에는 이러한 운동 에너지가 없습니다. 다른 라그랑지안 기반 접근법으로는 Gupta 외(2019), Qin(2019) 등이 있습니다.

4 방법

JAX로 오일러-라그랑주 풀기. 방정식 6을 효율적으로 구현하는 것은 매우 어려운 기술적 과제입니다. 이 포워드 모델을 훈련하려면 신경망의 역헤시안 $(\nabla_q \cdot \nabla \text{TLL})^{-1}$ (잠재적 특이 행렬을 피하기 위해 의사 역을 사용함)을 계산해야 하며, 다음과 같이 계산해야 합니다.

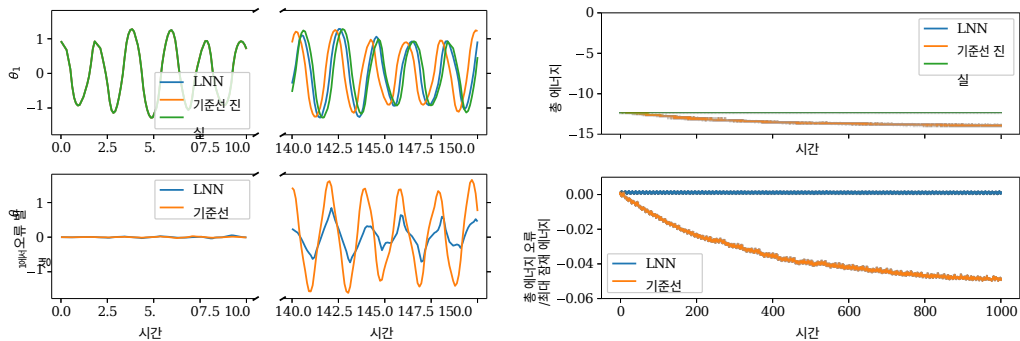
를 호출한 다음 역전파를 수행합니다. 행렬 역행렬은 좌표 Q dO 따라 (d^3) 로 스케일링됩니다. 놀랍게도 이 연산을 몇 줄의 JAX로 구현할 수 있습니다(Bradbury et al., 2018)(부록 참조). 코드를 GitHub¹.

훈련 세부 정보. 기준, HNN 및 LNN 모델 모두에 대해 500개의 숨겨진 유닛, 10부터 시작하는 감쇄 학습률⁻³, 배치 크기 32의 4계층 신경망 모델을 사용했습니다. 부록 C에 설명된 새로운 초기화 방식을 사용하여 모델을 초기화했으며, 이 방식은 LNN에 최적화되었습니다.

활성화 함수. LNN의 헤시안 함수를 취하기 때문에 활성화 함수의 2차 도함수가 중요합니다. 예를 들어, ReLU 비선형성은 2차 도함수가 0이기 때문에 좋지 않은 선택입니다. 더 나은 활성화 함수를 찾기 위해 이중 진자 문제에 대해 ReLU² (제공), ReLU³, tanh, 시그모이드 및 softplus 활성화에 대한 하이퍼파라미터 검색을 수행했습니다. 그 결과 소프트플러스의 성능이 가장 우수하여 모든 실험에 사용했습니다.

5 실험

이중 진자. 가장 먼저 고려한 작업은 시뮬레이션된 이중 진자 궤적의 데이터 세트였습니다. 질량과 길이를 1로 설정하고 60만 개의 무작위 초기 조건에 대한 순간 가속도를 학습했습니다. 그 결과 LNN과 기준선이 각각 7.3 과 $7.4 \cdot 10^{-2}$ 로 비슷한 최종 손실로 수렴하는 것을 발견했습니다. 더 중요한 차이는 에너지 보존에서 나타났는데, LNN은 시간이 지남에 따라 실제 에너지를 거의 정확하게 보존한 반면 기준선은 그렇지 않았습니다. 각각 100개의 시간 단계로 구성된 40개 이상의 무작위 초기 조건을 평균한 결과, 실제 총 에너지와 예측된 에너지 간의 평균 에너지 불일치는 기준 모델과 LNN 모델에서 각각 최대 위치 에너지의 8%와 0.4%였습니다.



(a) 각도 오차

(b) 에너지 오차

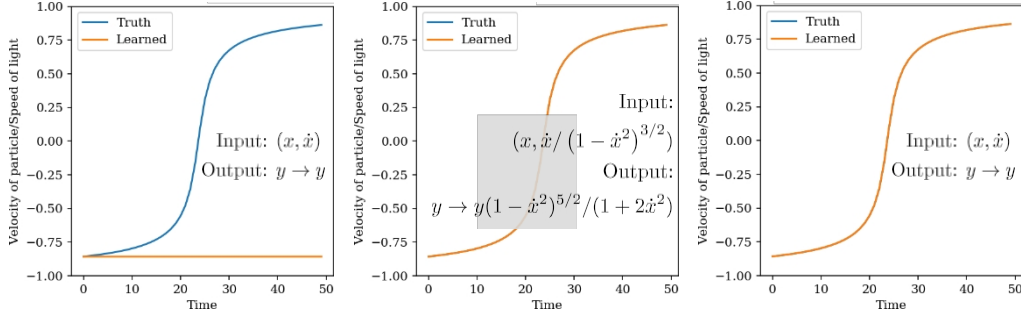
그림 2: 이중 진자 작업의 결과. (a)에서는 짧은 기간 동안 진자의 동역학을 모델링할 때 LNN과 기

준 모델이 비슷한 성능을 보이는 것을 볼 수 있습니다. 그러나 (b)에서 매우 긴 기간 동안의 에너지를 플롯하면 LNN 모델이 기준선보다 시스템의 총 에너지를 훨씬 더 잘 보존하는 것을 볼 수 있습니다.

균일한 포텐셜의 상대론 입자. 두 번째 과제는 균일 포텐셜의 상대론 입자입니다. 질량이 1이고 포텐셜 g 에서 $\mathbb{L} = 1$ 인 입자의 경우, 특수 상대성 이론은 라그랑지안 $= ((1 - \dot{q}^2)^{-1/2} - 1) + gq$ 를 제공합니다. 이 시스템의 정식 모멘타는 $q \cdot (1 - \dot{q}^2)^{-3/2}$ 이며, 이는 해밀턴 신경망은 $q \cdot$ 및 q 와 같은 간단한 관측 변수가 주어지면 실패한다는 것을 의미합니다. DeLaN 모델도 T 가 $q \cdot$ 에서 2차라고 가정하기 때문에 어려움을 겪을 것입니다. 이를 검증하려면

¹ https://github.com/MilesCranmer/lagrangian_nns

예측을 위해 임의의 초기 조건과 g 값을 가진 시스템에 대해 HNN과 LNN 모델을 학습시켰습니다. 그림 3은 HNN이 정식 좌표가 없으면 실패하는 반면, LNN은 이러한 추가 *선험적* 지식 없이도 작동할 수 있으며 정식 좌표로 학습한 HNN만큼 정확하게 시스템을 학습한다는 것을 보여줍니다.



(a) HNN, 임의 좌표. (

b) HNN, 정식 좌표.

(c) LNN, 임의 좌표.

그림 3: 상대론적 입자 작업의 결과. (a)에서 HNN 모델은 정식 좌표가 아닌 좌표에서 동역학을 학습하는 데 실패합니다. (b)는 정식 좌표가 주어졌을 때 HNN이 성공하는 경우입니다. 마지막으로 (c)에서는 LNN이 비정규 좌표에서도 정확한 동역학을 학습합니다.

라그랑지안 그래프 네트워크를 사용한 파동 방정식. 방정식 (6)은 그래프형 및 격자형 시스템과 같이 좌표가 연결되지 않은 시스템을 포함하여 다양한 유형의 시스템에 적용할 수 있습니다. 이를 모델링하기 위해 이제 라그랑지안 밀도를 학습하고 이를 합산하여 전체 라그랑지안을 형성합니다. 이는 산체스-곤잘레스 외(2019)의 해밀턴 그래프 네트워크, 더 구체적으로는 크랜머 외(2020)의 평탄화된 해밀턴 그래프 네트워크(Flattened Hamiltonian Graph Network)와 유사합니다. 간단히 설명하기 위해 국부적으로 의존하는 동역학(즉, 노드가 인접한 두 노드에 연결되어 있음)을 가진 1D 그리드에 초점을 맞춥니다.

연속적인 물질은 기타 줄의 변위와 같이 각 격자점 x_i 에서 φ_i 의 양으로 설명할 수 있습니다. 이러한 유형의 시스템을 모델링하는 한 가지 방법은 인접한 격자점의 양을 독립적인 좌표로 취급하고 연결된 모든 좌표 그룹에 대해 정규 LNN 방정식을 합산하는 것입니다. 그리드포인트가 n 개인 경우 총 라그랑지안은 다음과 같습니다:

$$L = \sum_{i=1:n} L_i, \text{ for } L_i = L_{\text{density}} \{ \varphi_j, \varphi_j \} \quad i_j \in \mathcal{E} \quad (7)$$

여기서 $\mathcal{E}_i = i, \{ \dots, i \}$ 연결된 인덱스 집합입니다. 인접한 그리드점만 중심 그리드점의 동역학에 영향을 미치는 1D 그리드의 경우, 이는 $i, i-1, i+1$ 입니다. 이제 φ 를 좌표로 하여 라그랑지안을 방정식 (6)에 대입하면 동역학을 풀 수 있습니다:

$$\ddot{\varphi} = \nabla_{\varphi} \cdot \nabla_{\dot{\varphi}}^{-1} \nabla_{\varphi} L - \nabla_{\dot{\varphi}} \cdot \nabla_{\dot{\varphi}}^{-1} \nabla_{\varphi} L, \quad (8)$$

여기서, 예를 들어 $\nabla_{\varphi} = \{ \frac{\partial}{\partial \varphi_1}, \frac{\partial}{\partial \varphi_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial \varphi_n} \}$. 헤시안 행렬은 0이 아닌 행렬이 최소화하는 점에 유의하세요. $\equiv \{ \ddot{\varphi} \}$

항목을 그래프의 '이웃의 이웃' 위치에 배치하면 훨씬 더 효율적으로 계산하고 반전할 수 있습니다. 예를 들어, 1D에서는 5번의 전진 후진 자동 차별화 패스로만 계산할 수 있으며 선형 시간 내에 반전할 수 있습니다.

이를 일반 LNN이라고 생각할 수 있는데, 고정된 좌표 집합에서 직접 라그랑지안을 계산하는 대신 좌표 그룹에 대해 라그랑지안 밀도를 누적하는 것입니다. 그래프 네트워크와 같이 다른 연결성을 사용하거나 연속적인 자료의 고차 공간 도함수를 근사화하려면 그래프의 인접성 행렬을 기반으로, 을 선택하면 됩니다. 이 모델은 그래프 신경망의 한 유형입니다(Scarselli 외., 2008). 라그랑지안 밀도 자체, 즉 밀도는 MLP로 모델링합니다. JAX로 모델을 작성하기 때문에 이를 쉽게 벡터화할 수 있습니다. 모델을 그리드 위에 배치합니다.

여기서 φ 는 파동 변위를 나타내는 1D 파동 방정식인 $\varphi(x, t)$ 를 고려합니다. 파동 속도 $c = 1$ 의 경우, 그 역학을 설명하는 방정식은 $\varphi'' = \partial^2 \varphi$ 로 쓸 수 있습니다. 라그랑지안

이 미분 방정식은 다음과 같습니다: $L = \int \varphi'^2 \frac{\partial \varphi^2}{\partial x} dx$. LNN이 이를 학습하기 위해 MLP는 다음을 수행합니다.

는 유한 차분 연산자를 근사하는 방법을 배워야 합니다. 그리도 간격의 경우 $L = \varphi'^2 \frac{\partial \varphi^2}{\partial x}$ 2입니다.

Δx (또는 이 방정식의 모든 변환 + 스케일링). 주기적 경계 조건이 있는 상자에서 파동 방정식을 시뮬레이션하고 그림 4와 같이 라그랑지안 그래프 네트워크를 사용하여 동역학을 학습합니다. 라그랑지안 그래프 네트워크는 파동 방정식을 정확하게 모델링하고 재료 전체에 통합된 에너지를 거의 정확하게 보존합니다.

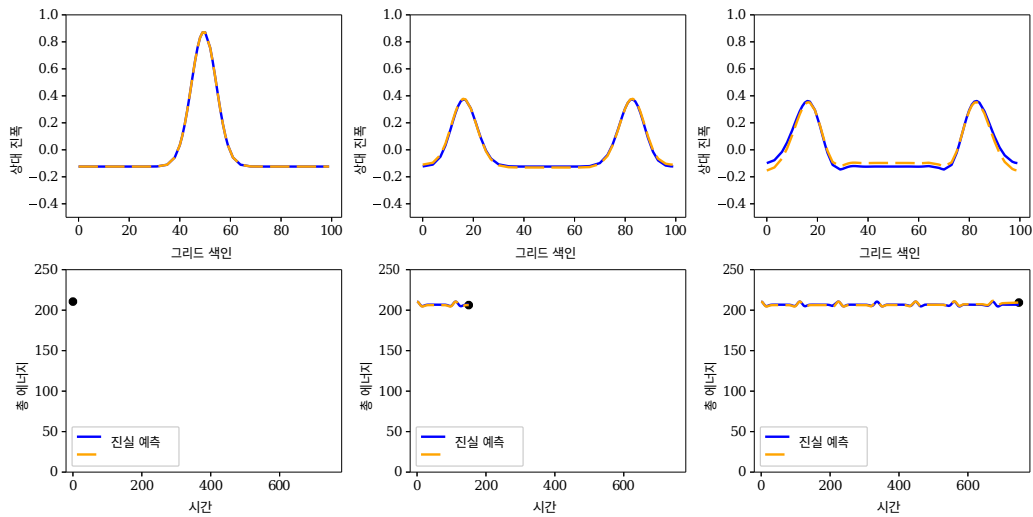


그림 4: 라그랑지안 그래프 네트워크를 사용한 1D 파동 방정식 작업의 결과. 여기서 LNN은 파도를 따라 인접한 세 개의 그리드 포인트에 대한 라그랑지안 밀도를 모델링하고 이 밀도를 합산합니다. 여기서 파도는 표시된 시간 동안 100개의 격자점을 약 3.5회 통과합니다. 플롯을 클릭하거나 [https](https://github.com/MilesCranmer/gifs/blob/master/wave_equation.gif)로 이동하여 동영상을 볼 수 있습니다:

https://github.com/MilesCranmer/gifs/blob/master/wave_equation.gif.

6 결론

저희는 임의의 라그랑지안을 학습할 수 있는 새로운 종류의 신경망인 라그랑지안 신경망을 도입했습니다. 해밀턴을 학습하는 모델과 달리, 이 모델은 정식 좌표가 필요하지 않으므로 정식 모멘타를 알 수 없거나 계산하기 어려운 상황에서도 잘 작동합니다. 이 모델을 평가하기 위해 우리는 이중진자라는 복잡한 물리 시스템에서 총 에너지를 효과적으로 보존할 수 있음을 보여주었습니다. 또한 해밀턴 학습이 어려움을 겪는 작업에서 우리 모델이 사소하지 않은 정식 모멘타를 학습할 수 있음을 보여주었습니다. 마지막으로, 1차원 파동 방정식을 사용한 그래프 버전의 모델을 시연했습니다.

감사의 말 마일즈 크랜머는 라그랑주 접근법의 이론을 여러 차례 논의하고 검증해 준 제레미 굿맨

과 논문 초안에 대해 많은 도움을 준 아담 버로우스와 올리버 필콕스에게 감사의 말을 전합니다.

참조

안톤 바흐친, 로렌스 반 데르 마텐, 저스틴 존슨, 로라 구스타프슨, 로스 거쉰. Phyre: 물리적 추론의 새로운 벤치마크. *신경 정보 처리 시스템의 발전에서*, pp. 5083-5094, 2019.

피터 바타글리아, 라즈반 파스카누, 매튜 라이, 다닐로 히메네스 레젠데 외. 사물, 관계 및 물리학에 대한 학습을 위한 상호작용 네트워크. *신경 정보 처리 시스템의 발전*, 4502-4510, 2016.

- 제임스 브래드버리, 로이 프로스틱, 피터 호킨스, 매튜 제임스 존슨, 크리스 리어리, 더걸 맥클라우린, 스카이 완더맨-밀른. JAX: Python+NumPy 프로그램의 컴포저블 변환, 2018. URL <http://github.com/google/jax>.
- 티안 치 첸, 율리아 루바노바, 제시 베펜쿠르트, 데이비드 K 뒤베노. 신경 미분 방정식, *신경 정보 처리 시스템의 발전*, 6571-6583쪽, 2018. URL <http://papers.nips.cc/paper/7892-신경-미분방정식.pdf>.
- 첸 정다오, 장 지안위, 마틴 아르조프스키, 레옹 보투. 심플렉틱 순환 신경망. *arXiv 프리프린트 arXiv:1909.13334*, 2019.
- 마일즈 크랜머, 알바로 산체스-곤잘레스, 피터 바타글리아, 루이 쉬, 카일 크랜머, 데이비드 스페르겔, 셴리 호. 귀납적 편향으로 딥러닝에서 기호적 모델 발견하기. *arXiv preprint arXiv:2006.11287*, 2020.
- 자비에 글로로와 요슈아 벤지오. 심층 피드포워드 신경망 훈련의 어려움에 대한 이해. *제13회 인공지능 및 통계에 관한 국제 컨퍼런스 논문집*, 249-256쪽, 2010.
- 사무엘 그레이다누스, 미스코 잠바, 제이슨 요신스키. 해밀턴 신경망. *신경 정보 처리 시스템의 발전*, 15353-15363, 2019.
- 자예쉬 굽타, 쿠날 멘다, 재커리 맨체스터, 미켈 J 코헨더퍼. 기계 시스템의 구조화된 학습을 위한 일반 프레임워크. *arXiv 사전 인쇄본 arXiv:1902.08705*, 2019.
- 허 카이밍, 장 상위, 렌 샤오칭, 지안 선. 정류기에 대해 깊이 파고들기: 이미지넷 분류에서 인간을 뛰어넘는 성능. *IEEE 컴퓨터 비전 국제 컨퍼런스 논문집*, 1026-1034쪽, 2015.
- 알렉스 크리제프스키, 일리야 수츠케버, 제프 힌튼. 심층 컨볼루션 신경망을 이용한 이미지넷 분류. *신경 정보 처리 시스템의 발전* 25, 1106-1114, 2012.
- 마이클 루터, 크리스티안 리터, 얀 피터스. 심층 라그랑지안 네트워크: 딥 러닝을 위한 사전 모델로 물리학 사용. *arXiv 사전 인쇄본 arXiv:1907.04490*, 2019.
- 홍 친. 이산장 이론의 기계 학습 및 서비스. *arXiv preprint arXiv:1910.10147*, 2019.
- 마티아스 루프, 알렉산드르 트카첸코, 클라우스-로버트 뮐러, 오 아나톨 본 릴리엔펠트. 기계 학습을 통한 분자 원자화 에너지의 빠르고 정확한 모델링. *피지컬 리뷰 레터*, 108(5):058301, 2012.
- 알바로 산체스-곤잘레스, 빅터 뱍스트, 카일 크랜머, 피터 바타글리아. 오드 적분기가 있는 해밀턴 그래프 네트워크. *arXiv 프리프린트 arXiv:1909.12790*, 2019.
- 프랑코 스카셀리, 마르코 고리, 아청 초이, 마르쿠스 하겐부흐너, 가브리엘 몬파르디니. 그래프 신경망 모델. *IEEE 신경망 트랜잭션*, 20(1):61-80, 2008.
- M. 슈미트와 H. 립슨. 실험 데이터에서 자유 형식 자연 법칙 추출. *과학*, 324 (5923):81-85, 2009.
- 크리스토프 T 슈트, 파하드 아르바자다, 스테판 치미엘라, 클라우스 R 뮐러, 알렉산드르 트카첸코. 심층 텐서 신경망에서 얻은 양자 화학적 통찰력. *Nature 커뮤니케이션*, 8:13890, 2017.

데이비드 실버, 줄리안 슈리트비저, 카렌 시모니안, 이오아니스 안토노글루, 아자 황, 아서 게즈, 토마스 휴버트, 루카스 베이커, 매튜 라이, 애드리안 볼튼 등. 인간의 지식 없이 바둑 게임 마스터하기. *Nature*, 550(7676):354, 2017.

일리아 수츠케버, 오리올 빈알스, 퀵 V. 르. 신경망을 이용한 시퀀스 대 시퀀스 학습. *CoRR*, abs/1409.3215, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1409.3215>.

피터 토스, 다닐로 히메네스 레젠데, 앤드류 예글, 세바스티앙 라카니에르, 알렉산다르 보테프, 이리나 히긴스. 해밀턴 생성 네트워크. *머신러닝 국제 컨퍼런스*, 2019.

부록

A 잭스로 오일러-라그랑주 풀기

여기서는 방정식 6의 간단한 JAX 구현을 소개합니다. 라그랑지안이 세 개의 벡터를 입력으로 받아 스칼라를 출력하는 미분 함수라고 가정합니다. 한편, q_t 는 $q(q)$ 의 속도(\dot{q})의 벡터이고, q_tt 는 가속도(\ddot{q})를 포함합니다. 벡터 m 은 비동적 파라미터를 나타냅니다.

```
q_tt = (
    jax.numpy.linalg.pinv(jax.hessian(라그랑지안, 1)(q, q_t, m)) @ (
        jax.grad(라그랑지안, 0)(q, q_t, m)
        - jax.jacobian(jax.jacobian(라그랑지안, 1), 0)(q, q_t, m) @ q_t
    )
)
```

손실 함수에 LNN 매개변수를 입력으로 사용하여 이 함수를 호출할 경우: `loss(params, ...)`, `jax.grad(loss, 0)(params, ...)`를 작성하여 그라데이션을 구할 수 있습니다.

B 라그랑지안 포워드 모델의 예

에 대한 정확한 함수를 학습한 경우 이 함수가 어떻게 작동하는지 보여주기가 위해 중력 g 을 따라 중력 g 방향으로 떨어지는 공의 예를₁으로 살펴 보겠습니다:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 - mgq_1 \quad (9)$$

여기서 g 는 국소 스칼라 중력장이고, m 은 공의 질량입니다. 포워드 모델로 동역학을 구하기 위해 필요한 미분을 계산하면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있습니다:

$$\nabla_{q_1} \nabla_{\dot{q}} L = \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\nabla_{q_1} \nabla_{\dot{q}} L = 0, \text{ 그리고 } (11)$$

$$\nabla_{q_2} L = \begin{pmatrix} -mg \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

따라서 다음
과 같은 결과
를 얻을 수
있습니다.

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \end{pmatrix} = (\nabla_{q_1} \nabla_{\dot{q}} L)^{-1} \nabla_{q_1} L - (\nabla_{q_1} \nabla_{\dot{q}} L) \dot{q} \quad (13)$$

$$= \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -mg \\ 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$= \begin{pmatrix} -g \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

이는 단순히 입자가 q_1 를 따라 아래쪽으로 가속하고, q_2 를 따라 일정한 속도로 이동한다는 것을 의미합니다.

C 초기화

Kaiming(He et al., 2015) 및 Xavier(Glorot & Bengio, 2010) 초기화와 같은 일반적인 최적화 기법은 일반 신경망에서 각 파라미터에 대한 출력의 기울기가 평균 0, 표준편차 1을 갖도록 최적화됩니다. 라그랑지 신경망의 특이한 최적화 목표는 매개변수에 대해 매우 비선형적이기 때문에 기존의 초기화 방식으로는 충분하지 않다는 사실을 발견했습니다.

더 나은 초기화 방식을 찾기 위해 단변량 가우스에 대한 각 파라미터의 기울기 KL-분산의 경험적 최적화를 수행했습니다. 다양한 신경망의 깊이와 폭에 대해 이 작업을 반복하고 경험적 공식을 결과에 적용했습니다.

이를 위해 고정된 깊이와 너비의 MLP에 대해 각 레이어마다 초기화 편차를 달리하여 2,500개의 최적화 단계를 실행했습니다. 바이어스는 항상 0으로 초기화했습니다. 숨겨진 노드 수를 50~300개, 숨겨진 레이어 수를 1~3개로 설정하여 200개의 무작위 하이퍼파라미터 설정에 대해 최적화된 σ 값을 기록했습니다. 그런 다음, 하이퍼파라미터의 함수로서 최적의 초기화 분산을 예측하는 기호적 회귀를 사용하는 방정식의 적합도를 찾기 위해 *eureka*(Schmidt & Lipson, 2009)를 사용했습니다:

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{n}} \left(2. \text{ 2첫 번째 숨겨진 레이어 } i \in \{1, \dots, n\} \right) \quad (16)$$

이 모델은 단변량 가우스에서 샘플링한 2개의 입력 좌표와 2개의 입력 좌표 속도에 최적화되었습니다.

훈련 중에 숨겨진 가중치 행렬의 크기는 $n \times n$ 이고 각 가중치 행렬은 $N(0, \sigma^2)$ 에서 샘플링되었습니다. 100노드 4계층 모델은 $\{(4, 100), (100, 100), (100, 100), (100, 1)\}$ 모양의 가중치 행렬을 가지며 각 가중치 행렬은 다음에서 샘플링된 초기화를 가집니다.
 $\{N(0, 0.22), N(0, 0.058), N(0, 0.116), N(0, 10)\}$ 을 각각 사용합니다.