Моделирование динамики физических систем с помощью Physics-Informed Neural Networks

А. И. Богданов, С. К. Панченко
bogdanov.ai@phystech.edu; panchenko.sk@phystech.edu

В работе решается задача улучшения качества моделирования динамики сложных механических систем с помощью нейронных сетей. Большинство подходов, оперирующих лишь набором обобщённых координат в качестве входа, не способны предсказывать поведение системы с высокой точностью. В работе исследуется Нётеровская Лагранжева нейронная сеть, которая учитывает закон сохранения энергии, импульса, момента импульса и способна восстанавливать лагранжиан системы по траекториям её движения. Вместо полносвязанных слоев в сети предлагаются модификации внутренней архитектуры, основанные на свёрточных и рекуррентных нейронных сетях. Сравнение результатов моделирования проводится на искусственно сгенерированных данных для пружинной системы. Результаты подтверждают то, что качество модели увеличивается, если она обладает информацией о системе.

Ключевые слова: *нейронная сеть; механическая система, лагранжиан*

1 Введение

Для моделирования динамики физических систем обычно применяется Лагранжева динамика [3]. Чтобы её использовать, нужно построить лагранжиан L, который определяется как разница между кинетической энергией (T) и потенциальной энергией (V) системы:

$$L = T - V.$$

Для получения уравнений движения, нужно воспользоваться уравнением Эйлера-Лагранжа:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0,$$

которое получено из *принципа наименьшего действия.*

Нейронные сети ускоряют и упрощают моделирование динамики физических систем, так как для для их использования не требуется знания лагранжиана, а также нет необходимости решать сложные системы дифференциальных уравнений. Но классические нейронные сети не обладают информацией о системе, которую моделируют.

Лагранжевы нейронные сети (LNN) [2] аппроксимируют лагранжиан системы, из которого с помощью уравнения Эйлера-Лагранжа находится динамика системы. В этой модели лагранжиан не зависит от времени, т.е. учитывается только закон сохранения энергии, но не учитываются другие законы сохранения.

Нётеровские нейронные сети (NLNN) [4], которые являются модификацией Лагранжевых нейронных сетей, учитывают законы сохранения импульса и момента импульса и моделируют только потенциальную энергию системы, зависящую от разности обобщённых координат.

В работе предлагается исследование модификаций Нётеровской нейронной сети, изменяющих структуру слоев: гипотеза состоит в том, что использование свёрточных и рекуррентных нейронных сетей в качестве внутренних слоёв NLNN способно улучшить их качестве в применении к некоторым системам.

Для вычислительного эксперимента используется пружинная система. В данной системе сохраняется энергия, импульс и момент импульса. Для моделирования динамики системы были взяты полносвязанная Нётеровская LNN, свёрточная Нётеровская LNN и рекуррентная Нётеровская LNN. Результаты сравнивались с траекториями пружинной системы, полученными аналитическим решением с помощью метода Рунге-Кутты 4-го порядка [1].

2 Постановка задачи регрессии динамики физической системы

Сведём задачу моделирования динамики системы к задаче регрессии. Задана выборка из m траекторий:

$$\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\}_{i=1}^{m},$$

где

$$\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)$$

– координаты траектории движения пружинной системы,

$$\mathbf{y}_i = \dot{\mathbf{x}}_i = (\dot{\mathbf{q}}_i, \ddot{\mathbf{q}}_i)$$

– динамика движения пружинной системы, $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^{r \times n}$, где r – количество координат, n – длина траектории.

Регрессионная модель выбирается из класса нейронных сетей:

$$\mathbf{f} \colon (\mathbf{w}, \mathbf{X}) \to \hat{\mathbf{y}},$$

где $\mathbf{w} \in \mathbb{W}$ – параметры модели,

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{X}, \mathbf{w}) \in \mathbb{R}^{2 \times r \times n}, \quad \mathbf{X} = \bigcup_{i=1}^{m} \mathbf{x}_i$$

.

Функцией ошибки взята квадратичная ошибка:

$$\mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{w}) = \|\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}\|_2^2.$$

Зафиксируем выборку $\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{w})$. Задача моделирования динамики системы представлена в виде задачи минимизации квадратичной ошибки:

$$\mathbf{w}^* = \underset{\mathbf{w} \in \mathbb{W}}{\arg\min} \left(\mathcal{L}(\mathbf{w})\right).$$

3 Как-нибудь назвать теоретический блок

4 Вычислительный эксперимент

[Цель эксперимента: сравнение качества моделирования механической системы различными нейронными сетями, качество будем сверять с аналитическим решением]

[Алгоритм]

4.1 Пружинная система

[Картинка системы + немного текста]

4.2 Лагранжиан системы

[Подсчет лагранжиана системы]

4.3 Аналитическое решение

[Полученное дифференциальное уравнения для аналитического решения]

4.4 Данные

[Данные синтетически сгенерированы, пока что генерация выглядит так: углы из диапазона от π до $-\pi$, скорости нулевые]

5 Результаты

[Ожидаются графики траекторий и график HSE от количества эпох (какие-то графики есть на github)]

6 Заключение

[Будет позже]

Литература

[1] Kendall Atkinson. *An introduction to numerical analysis.* John wiley & sons, 1991.

[2] Miles Cranmer, Sam Greydanus, Stephan Hoyer, Peter Battaglia, David Spergel, and Shirley Ho. Lagrangian neural networks. *arXiv preprint arXiv:2003.04630*, 2020.

[3] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, J.B. Sykes, and J.S. Bell. *Mechanics: Volume 1.* Course of theoretical physics. Elsevier Science, 1976.

[4] Северилов Павел. Выбор оптимальной модели в задаче моделирования динамики физической системы. *https://github.com/severilov/master-thesis.*