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 используются модификации внутренней архитектуры, основанные на свёрточных и рекурентных нейронных сетях. Сравнение результатов моделирования проводилось на искусственно сгенерированных данных для пружинной системы. Результаты подтверждают то, что качество модели увеличивается, если она обладает информацией о системе. 1.

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

1 Введение

Для моделирования динамики физических систем обычно применяется Лагранжева динамика [1]. 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 ускорят и упростят 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, поэтому используются иные. 2

3

Лагранжевы нейронные сети (LNN) [ссылка на Лагранжевы нейронные сети] 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) [ссылка на Пашу], 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 была взята 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 [ссылка на метод].

2 Постановка задачи регрессии динамики физической системы

Задачу моделирования динамики системы можно свести к задаче регрессии. Пусть дана 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:

$$\{\mathbf{f}_k\colon (\mathbf{w}, \mathbf{X}) \to \hat{\mathbf{y}} \mid k \in \mathcal{K}\},$$

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

В качестве функция ошибки взята квадратичная ошибка:

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

3

4

5

Таким образом, задача моделирования динамики системы представлена в виде задачи минимизации квадратичной ошибки:

$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}\in\mathbb{W}} (\mathcal{L}(\mathbf{w}))\,.$$

2.1 Название параграфа

Разделы и параграфы, за исключением списков литературы, нумеруются.

3 Заключение

Желательно, чтобы этот раздел был, причём он не должен дословно повторять аннотацию. Обычно здесь отмечают, каких результатов удалось добиться, какие проблемы остались открытыми.

Литература

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

Поступила в редакцию -

1. лучше писать основной текст статьи в настоящем времени
2. аналогично - ускоряют и упрощают
3. некрасиво расположена формула. Можно вынести в отдельную строчку или перенести формулу
4. mathcal{K} не введено. Я бы такое обозначение не использовал, у читателя может возникнуть ощущение, что у нас счетное количество моделей (за счет использования индекса)
5. Количество аргументов у функции должно быть одинаковым. Как вариант - явно написать, что Вы фиксируете выборку и L(y, X, w) = L(w) в дальнейшем по всей работе.