Способ восстановления некоторых функциональных зависимостей из эмпирических данных

Михаил Зыбин

Ноябрь 2019

1 Мотивация

Согласно философии позитивизма, научные теории - это паттерны в наблюдениях, и целью науки является их отыскание.

Примеры (хорошо было бы во всех этих задачах находить соответствующий закон) (пока считаем заряды положительными и не учитываем векторную природу сил)

1. Гравитационное и кулоновское взаимодействие между двумя телами. Физические величины $m_1, m_2, q_1, q_2, r, a_1, a_2$ связаны соотношениями

$$G\frac{m_1 m_2}{r^2} + k\frac{q_1 q_2}{r^2} = m_1 a_1$$

$$G\frac{m_1 m_2}{r^2} + k\frac{q_1 q_2}{r^2} = m_2 a_2$$

2. На моток проволоки помещен сосуд с жидкостью. По мотку пропускают ток, выделяемое тепло нагревает воду. Физические величины m, T_1, T_2, I, l, r, t связаны соотношением

$$cm(T_2 - T_1) = I^2 \rho \frac{l\rho}{\pi r^2} t$$

причем c - удельная теплоемкость жидкости, ρ - удельное сопротивление проводника - параметры материалов.

3. На планете массой M и радиусом R на высоте h совершает малые колебания математический маятник длиной l. Тогда имеется соотношение

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}} = 2\pi(R+h)\sqrt{\frac{l}{GM}}$$

4. Заряженная частица массой m и зарядом q движется со скоростью v и ускорением a в магнитном поле с индукцией B под углом α к линиям индукции.

$$qvB\sin(\alpha) = ma$$

$$r = \frac{m}{|q|}\frac{v\sin(\alpha)}{B}, h = \frac{2\pi}{B}\frac{m}{|q|}v\cos(\alpha)$$

где r - радиус спирали, h - шаг спирали

2 Формулы

Определим формулу глубины 0 как число:

$\phi_0(x_1, \dots x_n) = \lambda_0$

Далее определяем по индукции:

$$\phi_{k+1}(x_1, \dots x_n) = \phi_k(x_1, \dots x_n) + \sum_{i=1}^{n} (\lambda_{k+1,i,0} x_i^{\alpha_{k+1,i}} \phi_{k,i,0}(x_1, \dots x_n) + \lambda_{k+1,i,1} \sin(\phi_{k,i,1}(x_1, \dots x_n)) + \lambda_{k+1,i,2} \cos(\phi_{k,i,2}(x_1, \dots x_n))$$

Заметим, что при фиксированной выборке ϕ_k представляет собой дифференцируемую функцию от своих параметров $\lambda_{i,j}, \alpha_{i,j}$. Заметим, что процесс вычисления значения ϕ_k можно представить в виде графа, аналогичного нейронной сети, в котором на m-ом слое будут вычисляться значения формул грубины m. Поэтому к этой функции можно применять back-propagation.

Заметим, что количество параметров $P(k, n)$ у формулы ϕ_k при размерности пространства n задается рекуррентой $P(0, n) = 1, P(k+1, n) = n(3P(k, n) + 4) + 2n$.

Рекуррента разрешается $P(k, n) = (-6n + 3^k n^k(-1 + 9n))/(-1 + 3n) = O((3n)^k)$

3 Применение к примерам

1. формулы глубины 3

$$Gm_1^1 m_2^1 r^{-2} + kq_1^1 q_2^1 r^{-2} - m_1 a_1$$

$$Gm_1^1 m_2^1 r^{-2} + kq_1^1 q_2^1 r^{-2} - m_2 a_2$$

2. формула глубины 4

$$cmT_2 - cmT_1 - \frac{1}{\pi} I^2 l^1 t^1 r^{-2}$$

3. формула глубины 2

$$T - \frac{2\pi}{\sqrt{G}} RM^{-0.5} l^{0.5} - \frac{2\pi}{\sqrt{G}} RM^{-0.5} h l^{0.5}$$

4. формула глубины 4

$$qvB \sin(\alpha) - ma$$

4 Практический подход

Цель - чтобы формула на данных давала значение, достаточно близкое к нулю. Для этого мы будем перебирать глубину и для каждой глубины будем минимизировать MSE-лосс с нулевым таргетом методом back-propagation до тех пор, пока не найдем глубину, которая даст близость к нулю не больше наперед заданного threshold'a.

После этого стоит разделить все параметры λ на самый левый ненулевой λ.

5 Инкорпорирование идей Макса Тегмарка и не только

1. Бритва Оккама.

После завершения этапа обучения можно делать такое же упрощение, как и описанное в статье - жадным образом приближать параметры целыми или рациональными числами. Я также предлагаю приближать параметры числами, кратными π.

2. Lifelong learning

Возьмем пример 1. Мы можем заранее обучить агента в аналогичной ситуации, но без кулоновского взаимодействия, и в ситуации без гравитационного взаимодействия, и просто на закон Ньютона, когда есть только m, a, F. Тогда в примере 1 агент из величин m_1, m_2, r вычислит F_g, из величин q_1, q_2, r вычислит F_q, из величин m, a вычислит $F_{overall}$. После этого агент добавит эти три новые силы к уже имеющимся, и таким образом найдет формулу быстрее (которая будет просто $F_g + F_q = F_{overall}$).

3. Эксперименты

Пока что я описывал ситуацию, когда выбока уже дана. Однако можно делать по-другому. Разделим величины на такие, которые можно непосредственно менять (мутабельные) и которые нельзя (иммутабельные). Пимер иммутабельной - период колебаний из примера 3. Можно придумать, чтобы агенту давалось небольшое количество наблюдений, и дальше он бы делал наблюдения сам с помощью взаимодействия со средой вида "поменяй так-то мутабельные величины и покажи, что станет с иммутабельными".

4. Мне пока остается неясной ситуация, когда зависимостей несколько. В случае, если мы заранее знаем, что в выражениях иммутабельных переменных присутствуют только мутабельные, то можно проводить уписанную процедуру обучения несколько раз, убирая все иммутабельные переменные. кроме одной.

5. При желании из определения формулы можно убирать или добавлять желаемые функции (можно делать без синусов и косинусов, с логарифмами, как угодно).

Можно добавить возможность "сменить материал" - вместо медного проводника взять алюминиевый, вместо воды взять спирт... Для этого в определении формулы перед каждым параметром λ следует поставить дополнительный параметр, привязанный к материалу (тут есть аналогия с embedding-слоями в нейронных сетях, только в данном случае embegging будет присутствовать во всех слоях). Во время процедуры упрощения материалозависимые параметры тоже надо будет разделить на самый левый ненулевой, и выкинуть параметры при тех мономах, у которых λ окажется нулевой.