Симметрия моделей нейронных сетей в задаче моделирования динамики физических систем*

П. А. Северилов[1], **В. В. Стрижов**[2]

Аннотация: Лагранжевы нейронные сети (LNN) были разработаны для получения динамики ограниченного набора физических систем, что делает этот подход относительно узким. В данной работе рассматривается в терминах симметрий теорем Нётер связь моделей LNN с нейронными сетями более общего назначения с долговременной кратковременной памятью (LSTM), которая отлично подходит для прогнозирования последовательных задач, с базовой полносвязной модели нейронной сети (FC) и моделью Neural ODE, разработанной для решения дифференциальных уравнений. Эксперименты сравнения проводились на задаче моделирования физической системы двойного маятника.

Ключевые слова:

1 Введение

В классической механике, чтобы получить динамику физической системы, необходимо расписать все силы системы, уравнения сохранения импульса и энергии. Однако на практике моделирование динамики систем данным способом представляется затруднительным. Например, для системы двойного маятника.

Альтернативным подходом является лагранжева динамика, которая переформулирует проблему в терминах набора обобщенных координат, которые полностью описывают возможные движения частицы. Чтобы использовать лагранжеву динамику, необходимо построить лагранжиан L, который определяется как разница между кинетической энергией (T) и потенциальной энергией (U) системы:

$$L = T - U$$

*no

[1]Московский физико-технический институт, severilov.pa@phystech.edu

[2]Вычислительный центр имени А. А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук, Московский физико-технический институт, strijov@phystech.edu

Интеграл L по времени называется *действием*. Истинная траектория системы минимизирует этот интеграл (*принцип наименьшего действия*). Отсюда следует, что действие не может меняться при малых вариациях пути, что эквивалентно уравнению Эйлера-Лагранжа

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

Теорема Нетер говорит о том, что любая непрерывная симметрия L связана с сохраняющейся величиной системы. Например, если L не меняется при трансляции (т. е. обладает трансляционной симметрией), то сохраняется импульс. Если L не меняется при сдвигах во времени, то сохраняется энергия.

Получение динамики физической системы с помощью нейронных сетей обычно не учитывают законы сохранения и симметрию Нетер [1, 1, 1]. Простейшие подходы предсказывают ускорение, получая на вход координаты и скорости системы. Лагранжевы нейронные сети (LNN) используют альтернативный метод: предсказывается лагранжиан системы, из него дифференцированием получают динамику системы. Уравнение Эйлера-Лагранжа сохраняют энергию с течением времени, поэтому эта симметрия встроена в нейронную сеть LNN.

2 Связанные работы

3 Лагранжевы нейронные сети

3.1 Лагранжева механика

- **Проблемы HNN**: гамильтонов формализм требует, чтобы координаты системы были «каноническими»(($\mathbf{q}$, $\mathbf{p}$) должны подчиняться соотношениям, заданным скобками Пуассона)

- **Решение проблемы**: использовать лагранжианы систем (обеспечивают сохранение полной энергии, могут делать это с использованием произвольных координат)

Моделирование динамики системы с помощью лагранжиана

1. Найти аналитические выражения для кинетической и потенциальной энергии (T, V)

2. Записать лагранжиан $\mathcal{L} = T - V$

3. Применить ограничение Эйлера-Лагранжа $\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j}$

4. Решить получившуюся систему дифференциальных уравнений

3.2 Лагранжевы нейронные сети

3.3 DeLaN

Работа, в котором авторы рассматривают моделирование определенных типов лагранжевых систем. Предполагается, что кинетическая энергия является $T = \dot{q}^T M \dot{q}$, где M — q-зависимая положительно определенная матрица.

Этот подход хорошо работает для динамики твердого тела, которая включает в себя множество систем, встречающихся в робототехнике. Однако многие системы не обладают такой кинетической энергией: заряженная частица в магнитном поле, быстро движущийся объект в СТО.

3.4 LNN

Лагранжевы нейронные сети(LNN) Ключевой идеей является параметризовать нейронной сетью лагранжиан $\mathcal{L}$, получить выражение ограничения Эйлера-Лагранжа, обратно распространить ошибку через полученные ограничения.

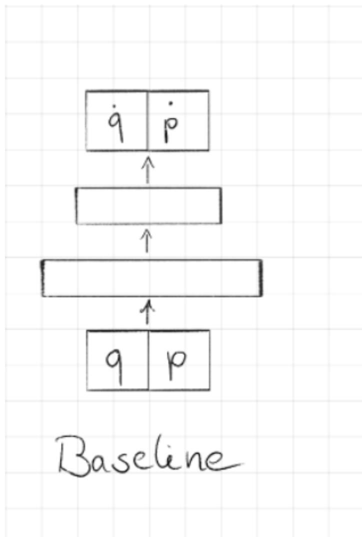
Получение динамики системы из предсказанного лагранжиана

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} \Rightarrow \frac{d}{dt}\nabla_{\dot{q}}\mathcal{L} = \nabla_q \mathcal{L}$$
$$\left(\nabla_{\dot{q}}\nabla_{\dot{q}}^{\top}\mathcal{L}\right)\ddot{q} + \left(\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^{\top}\mathcal{L}\right)\dot{q} = \nabla_q \mathcal{L}$$
$$\ddot{q} = \left(\nabla_{\dot{q}}\nabla_{\dot{q}}^{\top}\mathcal{L}\right)^{-1}\left[\nabla_q \mathcal{L} - \left(\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^{\top}\mathcal{L}\right)\dot{q}\right]$$

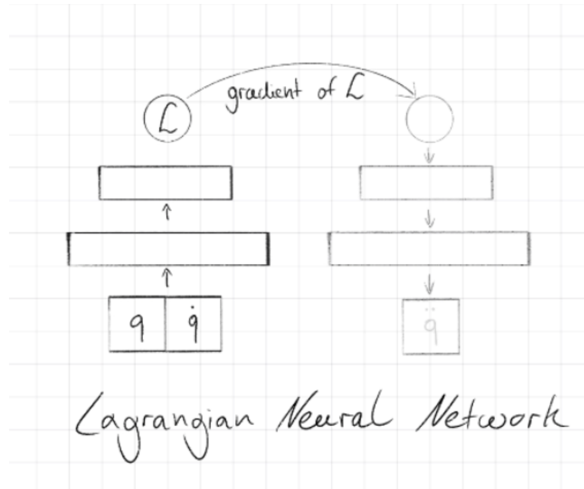
Таким образом, для заданного набора координат $x_t = (q_t, \dot{q}_t)$ получили метод вычисления $\dot{x}_t = (\dot{q}_t, \ddot{q}_t)$ из параметризованного лагранжиана.

Исходя из вышесказанного получаем **функцию ошибки**:

$$\mathcal{L} = \left\|\dot{x}_t^{\mathcal{L}_\theta} - \dot{x}_t^{true}\right\|_2$$



(a) Схема работы базового решения моделирования динамики физической системы нейронными сетями



(b) Схема работы Lagrangian Neural Networks (LNN) моделирования динамики физической системы

4 Теорема Нётер

Определение 1 (Генераторы и инвариантность). Пусть $L(t, x, \dot{x})$ – лагранжиан. Рассматривается преобразование

$$\begin{aligned} t &\mapsto t' = T(t, \boldsymbol{x}, \epsilon) \\ \boldsymbol{x} &\mapsto \boldsymbol{x}' = X(t, \boldsymbol{x}, \epsilon) \end{aligned} \tag{1}$$

где преобразование является гладким как функция от ϵ и при $\epsilon = 0$ является тождественным и. Пусть

$$\begin{aligned} T(t, \boldsymbol{x}, \epsilon) &= t + \tau(t, \boldsymbol{x})\epsilon + O\left(\epsilon^2\right) \\ X(t, \boldsymbol{x}, \epsilon) &= \boldsymbol{x} + \xi(t, \boldsymbol{x})\epsilon + O\left(\epsilon^2\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Члены $\tau(t, x)$ и $\xi(t, x)$ называются генераторами преобразования. Генератор оставляет Лагранжиан инвариантным, если

$$\mathcal{L}\left(t', \boldsymbol{x}', \dot{x}'\right) \frac{dt'}{dt} - \mathcal{L}(t, \boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}) = O\left(\epsilon^2\right) \tag{3}$$

Теорема 1 (Закон сохранения Нётер). Пусть $\mathcal{L}(t, \boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}})$ – лагранжиан, инвариантный относительно генераторов $\tau(t, \boldsymbol{x})$ и $\boldsymbol{\xi}(t, \boldsymbol{x})$. Пусть $\boldsymbol{x}(t)$ – экстремальная функция $J[\boldsymbol{x}] = \int \mathcal{L}(t, \boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}) dt$. Тогда

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}, \boldsymbol{\xi} \right\rangle + \left(\mathcal{L} - \left\langle \dot{\boldsymbol{x}}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} \right\rangle \right) \tau$$

сохраняется по $\boldsymbol{x}(t)$.

5 Вычислительный эксперимент

В рамках вычислительного эксперимента написан программный комплекс для решения поставленных задач [?].

5.1 Постановка задачи

Пусть дана выборка $(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$, где $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ — матрица независимых переменных, $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ — матрица целевых переменных.

5.2 Данные

В качестве моделируемой физической системы взята система двойного маятника (Рис. 2). Двойной маятник образуется путем присоединения одного маятника к другому. Каждый маятник состоит из груза, соединенного с безмассовым жестким стержнем, который может двигаться только в вертикальной плоскости. Ось первого маятника закреплена в точке O. Все движения без трения.

Данная система имеет лагранжиан:

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2) l_1^2 \dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 l_2^2 \dot{\theta}_2^2 + m_2 l_1 l_2 \dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \\ + (m_1 + m_2) g l_1 \cos\theta_1 + m_2 g l_2 \cos\theta_2$$

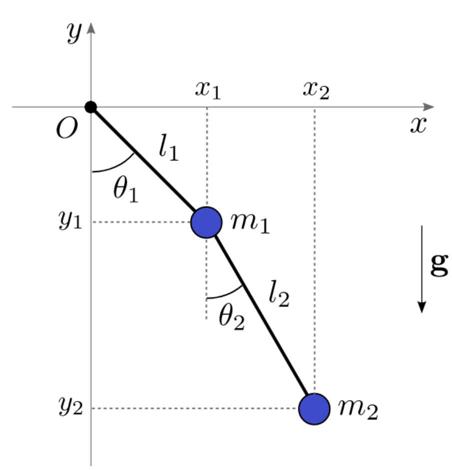


Рис. 2: Схема физической системы двойного маятника

Исходя из данного лагранжиана получаем канонические координаты системы (Рис. 3)

$$\begin{aligned} p_{\theta_1} &= \tfrac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_1} = (m_1 + m_2) l_1^2 \dot{\theta}_1 + m_2 l_1 l_2 \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \\ p_{\theta_2} &= \tfrac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_2} = m_2 l_2^2 \dot{\theta}_2 + m_2 l_1 l_2 \dot{\theta}_1 \cos(\theta_1 - \theta_2) \end{aligned} \tag{4}$$

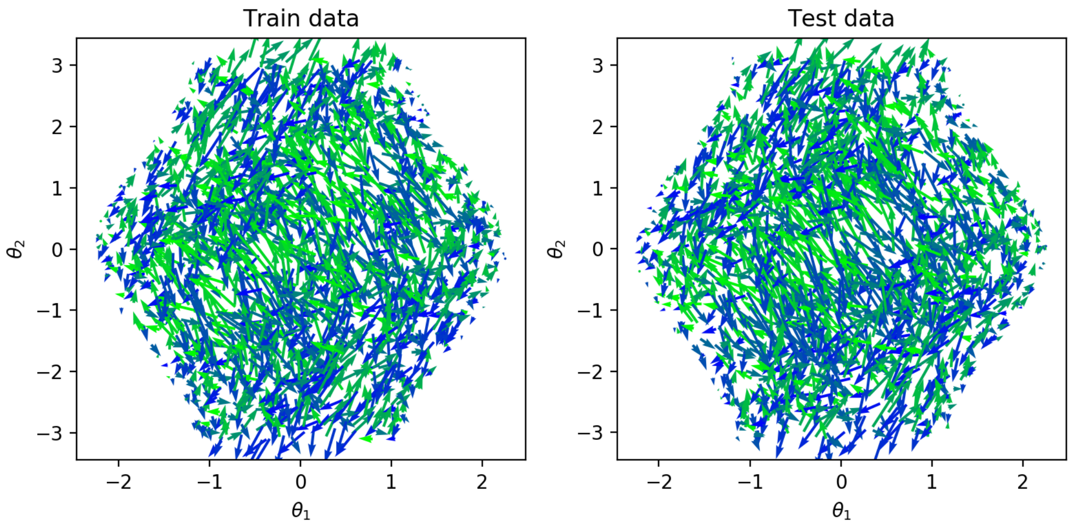


Рис. 3: Визуализация данных канонических координат системы двойного маятника

5.3 Исследуемые модели нейронных сетей

5.3.1 Полносвязная нейронная сеть

$$f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) := \sigma_K \left(W^{(K)} \sigma_{K-1} \left(W^{(K-1)} \cdots \sigma_1 \left(W^{(1)} \boldsymbol{x}\right)\right)\right) \tag{5}$$

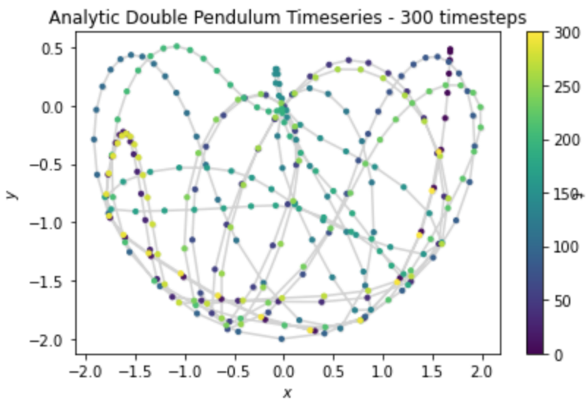
5.3.2 LSTM

5.3.3 Neural ODE

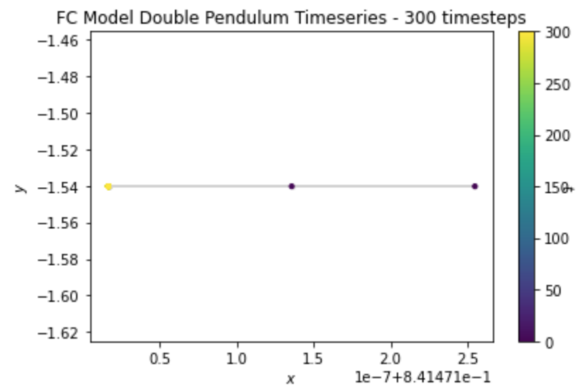
5.3.4 LNN

5.4 Результаты

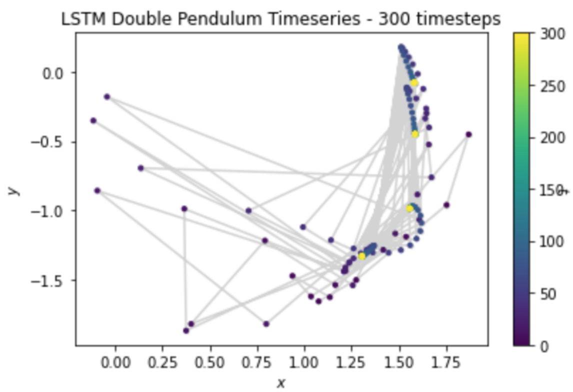
Результаты моделирования динамики системы двойного маятника различными видами нейронных сетей представлены на рисунке 4



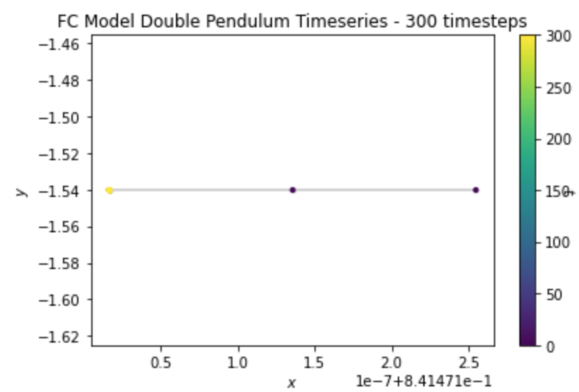
(a) Аналитическое решение



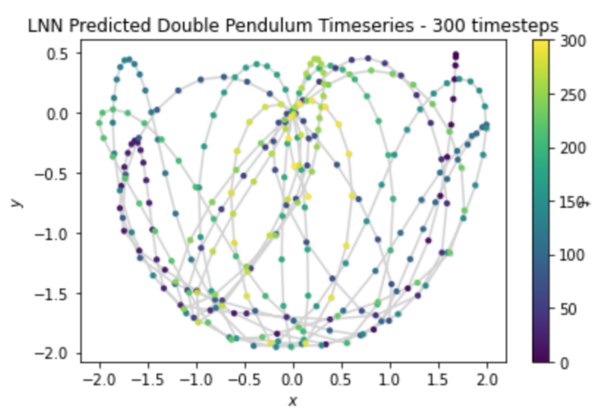
(b) Динамика системы с помощью полносвязной нейронной сети



(c) Динамика системы с помощью LSTM



(d) TODO Динамика системы с помощью Neural ODE



(e) Динамика системы с помощью LNN

Рис. 4: Моделирование динамики системы двойного маятника различными видами нейронных сетей: аналитическое решение, полносвязная нейронная сеть, LSTM, LNN.

6 Заключение

В работе рассмотрена задача

Список литературы

[1] Samuel Greydanus, Misko Dzamba, and Jason Yosinski. Hamiltonian neural networks. In H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. Fox, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 32. Curran Associates, Inc., 2019.