

无时间标记动力系统学习阶段总结

1 现阶段结果

1.1 Neural Canonical Transform

学习1D、2D 谐振子问题, q 相对误差0.5%,p相对误差1.5%,Hamiltonian 相对误差2%.训练时间10min。
对于非谐振子问题无法拟合、对于谐振子问题神经网络收敛于恒同映射。

1.2 直接Wasserstein 参数回归

1.2.1 谐振子

$$\mathcal{H}(p, q) = \sum_{k=1}^2 \frac{p_k^2 + \theta_k^2 q_k^2}{2}, \text{ where } \theta = [1, 2], q(0) = [1, 1], p(0) = (0, 0)$$

1D

回归结果	p,q误差	时间误差	H误差
1.0008,2.0010	0.5%,0.2%	0.1%	0.8%

5D

回归结果	p,q误差	时间误差	H误差
0.9944,1.9913,1.4902,0.9952,1.9919		0.3%	1.2%

1.2.2 Lotka–Volterra System

$$\mathcal{H}(p, q) = p - \exp p + 2 q - \exp q, \text{ 参数化为 } \mathcal{H}(p, q) = A p - B \exp p + C q - D \exp q$$

1D

回归结果	p,q误差	时间误差	H误差
0.9902,0.9922,2.0853,1.0780	0.3%,0.6%		3.5%

2D

回归结果	p,q误差	时间误差	H误差
1.0226,1.0176,1.8839, 0.9225	1.1%,0.7%	0.8%	0.79%
0.9735, 0.9734,2.1232,1.1269			

1.2.3 Henon–Heiles System

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathcal{H}(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} (q_1^2 + q_2^2) + \left(q_1^2 q_2 - \frac{q_2^3}{3} \right)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} A (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} B (q_1^2 + q_2^2) + \left(C q_1^2 q_2 - D \frac{q_2^3}{3} \right)$$

回归结果	p,q误差	时间误差	H误差
0.9998,1.0068,1.0128,1.0638	0.4%,0.7%	0.8%	0.2%

1.2.4 多项式模型

1D 冗余1参数

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} - \mathbf{p}^3 - \mathbf{q} + \mathbf{q}^3, \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = A_p \mathbf{p} + B_p \mathbf{p}^2 + C_p \mathbf{p}^3 + A_q \mathbf{q} + B_q \mathbf{q}^2 + C_q \mathbf{q}^3$$

p 参考值: $[1, 0, -1]$, 反演值: $[1.0225, -0.0857, -0.9398]$

q 参考值: $[-1, 0, 1]$, 反演值: $[-1.0031, -0.0001, 0.9957]$

H误差: 0.9%

时间误差: 0.5%

2D 冗余1参数

p $[0.9081 \ 0.0031 \ -0.9535], [0.9049 \ 0.0036 \ -0.9522]$

q $[-0.9980 \ -0.0004 \ 0.9946], [-0.9980 \ -0.0017 \ 0.9940]$

H误差: 9%

时间误差: 1.2%

2D 冗余2参数

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = A_p \mathbf{p} + B_p \mathbf{p}^2 + C_p \mathbf{p}^3 + D_p \mathbf{p}^4 + A_q \mathbf{q} + B_q \mathbf{q}^2 + C_q \mathbf{q}^3 + D_q \mathbf{q}^4$$

p $[0.9990 \ -0.0500 \ -0.9576 \ -0.0075], [0.8657 \ 0.0905 \ -1.0069 \ -0.0049]$

q $[-0.9841 \ -0.0009 \ 0.9082 \ -0.0701], [-0.9802 \ 0.0017 \ 0.8578 \ -0.1093]$

H误差: 9%

时间误差: 0.5%

2 下阶段可行方向

2.1 模型普适性

这一部分是继续做一些更难或者更现实的模型来说明算法的普适性:

- 做更高维的问题 (20维-50维), 这个对谐振模型已经有结果;
- 把模型算法调得更精确 (设定阈值让参数在阈值下强行稀疏化);
- 用NN建模Hamiltonian尝试对更一般的H学习和反演;
- 用更冗余、多形式的Library来学习一般化的Hamiltonian;
- 调研Haizhao Yang 学习表达式树的方式改进模型, 学习更复杂的问题;
- 调研其他计算分布距离的方法, 尝试互信息、JS divergence、KL divergence、MMD等;

2.2 模型优势指标

第二部分是尝试从多种指标评判模型的优劣, 并依据这些指标的灵敏性分析改善模型

- 利用反演的时间label通过Sindy进行参数反演, 求解得到参数与真实参数进行比较, 期望能通过Sindy恢复出原有参数。(问题: 恢复出来的时间具有非等距性, 可能需要线性多部法)
- 将反演相图数据对每一维度的分布进行拟合展示, 看看会不会是分布偏差造成的问题, 以此研究Wasserstein Distance对分布偏差的分辨能力。(若属实则需要借助其他分布距离进行修正)
- 学习行星问题: 具有多守恒量, 比较学到的模型对除Hamiltonian外其他量的精确程度。