

Модели физически информированных / осведомленных классических Лагранжевых / Гамильтоновых нейронных сетей в глубоком обучении

Д. П. Зрелова^{1,2}, С. В. Ульянов^{1*}

¹ Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

² ГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна», г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19

* ulyanovsv46_46@mail.ru

Аннотация

Рассмотрены принципы построения систем глубокого машинного обучения на основе учета информации о физических свойствах исследуемого объекта управления типа автономного робота. Платформой для разработки интеллектуального инструментария являются модели глубокого машинного обучения с применением физически информированных нейронных сетей. Большинство из разрабатываемых методов построения моделей идентификации системы представляют собой либо модели «черного ящика» (т. е. общие модели, основанные на обучающих данных), либо так называемые модели «белого ящика» (например, модели пространства состояний/управления, которые могут быть явно выражены математически). Таким образом, направление развития состоит в исследовании модели «серого ящика» в пространстве состояний. Модель «серого ящика» означает модель, которая обучается на данных, руководствуясь при этом информацией о применяемых некоторых физических свойствах или законов. Такие модели можно в дальнейшем применять для адаптивного управления и самоорганизации. Следовательно, рассматривается использование моделей в пространстве состояний. Особенность физически информированных нейронных сетей заключается в том, что изначально учитываются лежащее в основе описание физической интерпретации уравнений в частных или обыкновенных производных, то есть физику проблемы вместо того, чтобы пытаться вывести решение на основе исключительно данных, то есть путем аппроксимации нейронной сетью набора пар «состояние-значение». В качестве такого класса систем обучения рассмотрены Лагранжевы и Ньютоновы нейронные сети. На конкретных примерах показаны преимущества и особенности применения обсуждаемых типов физически информированных нейронных сетей.

Ключевые слова: физически информированные нейронные сети, Лагранжевы нейронные сети, Гамильтоновы нейронные сети, нейронные сети с физическими ограничениями

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования: Зрелова Д. П., Ульянов С. В. Модели физически информированных / осведомленных классических Лагранжевых / Гамильтоновых нейронных сетей в глубоком обучении // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2022. Т. 18, № 2. С. 310-325. doi: <https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202202.310-325>

© Зрелова Д. П., Ульянов С. В., 2022



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.



Physics-Informed Classical Lagrange / Hamilton Neural Networks in Deep Learning

D. P. Zrelova^{a, b}, S. V. Ulyanov^{a*}

^a Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation
Address: 6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation

^b Dubna State University, Dubna, Russian Federation
Address: 19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation
*ulyanovsv46_46@mail.ru

Abstract

The principles of constructing deep machine learning systems based on taking into account information about the physical properties of the studied control object, such as an autonomous robot, are considered. The platform for the development of intelligent tools is deep machine learning models applying physics-informed neural networks. Most of the methods under development for constructing system identification models are either “black box” models (i.e., general models based on training data) or so-called “white box” models (e.g., state-space/control models, which can be explicitly expressed mathematically). Thus, the direction of development is to study the gray box model in the state space. A gray box model means a model that is trained on data while being guided by information about some physical properties or laws that apply. Such models can be further applied for adaptive control and self-organization. Therefore, the use of state-space models is considered. A feature of physically informed neural networks is that they initially take into account the underlying description of the physical interpretation of partial or ordinary differential equations, that is, the physics of the problem, instead of trying to derive a solution based solely on data, that is, by approximating a set of pairs by a neural network “state-value”. Lagrange and Newton neural networks are considered as such a class of learning systems. Specific examples show the advantages and features of using the discussed types of physics-informed neural networks.

Keywords: Physics-informed neural networks, Lagrange neural networks, Hamilton neural networks, neural networks with physical constraints

The authors declare no conflict of interest.

For citation: Zrelova D.P., Ulyanov S.V. Physics-Informed Classical Lagrange / Hamilton Neural Networks in Deep Learning. *Sovremennye informacionnye tehnologii i IT-obrazovanie = Modern Information Technologies and IT-Education*. 2022; 18(2):310-325. doi: <https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202202.310-325>



Введение

Идея создания обучающихся машин, основанных на явном учете физических закономерностей, которые используют систематически структурированные предварительные знания о решении, восходит к более ранним исследованиям, которые выявили многообещающую технику эффективного применения таких предварительных знаний [1, 2]. Так, например, использовали регрессию гауссовского процесса для построения представлений линейных операторных функционалов, точного вывода решения и предоставления оценок неопределенности для различных физических задач; затем это было расширено и физически информированные нейронные сети (ФИНС) фактически были представлены в 2017 году как новый класс решателей, управляемых данными и проиллюстрирован подход ФИНС для решения нелинейных уравнений в частных производных, как уравнения Шрёдингера, Бюргера и Аллена-Кана. Были разработаны структуры ФИНС, которые могут решать как прямые задачи оценки решений управляющих математических моделей, так и обратные задачи, где параметры модели извлекаются и изучаются из наблюдаемых данных [3, 4].

Особенность ФИНС заключается в том, что изначально учитывают лежащее в основе описание физической интерпретации уравнений в частных или обыкновенных производных, то есть физику проблемы вместо того, чтобы пытаться вывести решение на основе исключительно данных, то есть путем аппроксимации нейронной сетью (НС) набора пар «состояние-значение».

С точки зрения применения глубокого машинного обучения для создания гибридных физических моделей возникли две основные парадигмы:

- физико-информированные нейронные сети (ФИНС);
- нейронные сети с физическими ограничениями (НСФО).

Модели ФИНС включают в себя как уравнения в частных / обыкновенных производных (УЧП – PDE / ОДУ – ODE), так и его начальные/граничные условия («мягкие» сети) в функции потерь при обучении, в то время как НС с физическими ограничениями, т. е. НС «без данных», применяют начальные/граничные условия («жесткие» НС) через пользовательскую архитектуру НС при встраивании УЧП в функции потерь обучения. Этот метод мягкой формы описан в [3], где был придуман термин «физически информированные нейронные сети» (ФИНС – PINN – physics-informed neural network).

Большинство динамических моделей реальных объектов управления (ОУ) не включают экспериментальные данные. Сбор данных для слабоструктурированных и плохо формализуемых динамических объектов сложен, но необходим для большей гибкости оценки параметров модели.

Тем не менее, традиционные методы идентификации систем по-прежнему доминируют сегодня, несмотря на недавние прорывы в области глубокого машинного обучения (ГМО). Поэтому стремятся к разработке подхода, основанного на реальных данных, который включает в себя законы физики, чтобы изучить модель ОУ в пространстве состояний. Точнее, изучение структуры, например лагранжевой нейронной сети (ЛНС) или гамилтоновой нейронной сети (ГНС) для многомерных систем.

Кроме того, расширяется функциональная структура ЛНС для учета неконсервативных сил, действующих на систему, таких

как демпфирование и управление. НС способны, например, к обучению на смоделированных данных ОДУ или УЧП. Обученная модель оценивается путем интегрирования путей из различных начальных состояний и сравнения их с истинной динамикой. Целью является исследование метода системной идентификации объекта, который может проектировать модель в пространстве состояний на основе смоделированных данных. Таким образом, метод выбора сужен до задачи ГМО с учителем, чтобы исследовать его потенциал в возможности физически корректной интерпретации смоделированной динамики.

Большинство из разрабатываемых методов построения моделей для идентификации системы представляют собой либо модели «черного ящика» (т. е. общие модели, основанные на обучающих данных), либо так называемые модели «белого ящика» (например, модели пространства состояний/управления, которые могут быть явно выражены математически). Таким образом, направление развития состоит в том, чтобы исследовать модель «серого ящика», которая будет изучать модель в пространстве состояний. Здесь модель «серого ящика» означает модель, которая обучается на данных, руководствуясь при этом информацией о применяемых некоторых физических свойствах или законов. Такие модели можно в дальнейшем применять для адаптивного управления. Таким образом, рассматривается использование ЛНС для изучения моделей в пространстве состояний.

Ключевые моменты ГМО

Отметим некоторые ключевые моменты применения физической информированности об ОУ в методах ГМО:

- ГМО на основе физических данных легко интегрирует данные и модели математической физики даже в частично понятных, неопределенных и многомерных контекстах.
- Методы регрессии на основе ядра или НС предлагают эффективные, простые и бессвязные реализации.
- НС, основанные на изучении физических свойств модели ОУ, эффективны и действенны для некорректных и обратных задач, а в сочетании с декомпозицией предметной области их можно масштабировать для решения больших задач.
- Операторная регрессия, поиск новых внутренних переменных и представлений, а также эквивариантные архитектуры НС со встроенными физическими ограничениями являются перспективными областями будущих исследований.
- Существует потребность в разработке новых структур и стандартизированных контрольных показателей, а также новой математики для масштабируемых, надежных и точных обучающихся машин следующего поколения, основанных на теоретико-экспериментальной физике.
- Погрешности наблюдений могут быть введены непосредственно через данные, которые воплощают лежащую в основе физику, или тщательно разработанные процедуры дополнения данных. Обучение системы ГМО на таких данных позволяет ей изучать функции, векторные поля и операторы, отражающие физическую структуру данных.
- Индуктивные погрешности соответствуют предварительным предположениям, которые могут быть включены в



архитектуру модели ГМО с помощью специализированных вмешательств, так что искомые прогнозы гарантированно (неявно) удовлетворяют набору заданных физических законов, обычно выражаемых в виде определенных математических ограничений. Это наиболее принципиальный способ сделать алгоритм обучения основанным на физике, поскольку он позволяет строго соблюдать лежащие в его основе физические ограничения. Однако такие подходы могут быть ограничены учетом относительно простых групп симметрии (таких как трансляции, перестановки, отражения, повороты и т. д.), которые известны априори и часто могут приводить к сложным реализациям, которые трудно масштабировать.

- Предубеждения при обучении могут быть вызваны соответствующим выбором функций потерь, ограничений и алгоритмов вывода, которые могут модулировать фазу обучения модели ГМО, чтобы явно гарантировать сходимость к решениям, которые соответствуют непротиворечивой физической интерпретации принятой модели физического описания ОУ. Используя и настраивая такие мягкие штрафные ограничения, основные физические законы могут быть удовлетворены только приблизительно; однако это обеспечивает очень гибкую платформу для введения широкого класса основанных на физике смещений, которые могут быть выражены в виде интегральных, дифференциальных или дробных уравнений.

Эти различные способы смещения алгоритма обучения в сторону физически согласованных решений не являются взаимоисключающими и могут быть эффективно объединены для получения очень широкого класса гибридных подходов к созданию обучающихся машин, основанных на физике.

ГМО на основе информации о физических свойствах модели ОУ

Разработать конструктивный алгоритм ГМО, основанным на физике, равнозначно введению соответствующих наблюдаемых, индуктивных или обучающих изменений, которые могут направить процесс обучения в направлении поиска физически непротиворечивых и согласованных решений.

Таким образом, например, ЛНС позволяют использовать глубокое обучение с учетом законов физики в рамках системной идентификации. Преимущество ЛНС состоит в том, что они могут изучать симметрии и учитывать сохранение энергии, что следует непосредственно из уравнения Эйлера-Лагранжа. Модели ЛНС также имеют возможность обучаться на произвольных данных и превосходит простые модели искусственных нейронных сетей (ИНС) с меньшим количеством данных. В результате становится лучшим методом для изучения физических систем на основе наблюдаемых данных.

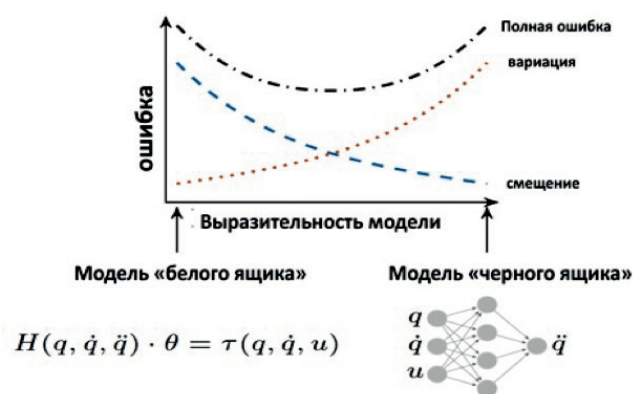
Эффективность метода ГМО с учетом физических свойств (описываемые в терминах ЛНС и ГНС) рассматривается при изучении модели динамики в пространстве состояний автономного ОУ. Вопросы исследования в этом подходе можно сформулировать следующим образом: как включить в метод манипуляции данными заключенную в них содержательную информацию о физических свойствах для изучения качественных свойств модели ОУ в пространстве состояний?

Применение ГМО в задачах компенсации неопределенности физической информированности о свойствах робототехнического ОУ

При разработке контроллера для роботизированной области часто полагаются на точные модели ОУ, которым стремятся управлять. В этом случае решают проблему, следует ли разрабатывать точную модель ОУ в предметной области или использовать подход «черного ящика», основанный на данных, для построения такой модели. Первый подход требует предположений о системе, таких как ее кинематическая структура, инерционные свойства и предположения относительно сил, действующих на систему, оставляя лишь несколько параметров для калибровки на основе данных.

С другой стороны, второй подход интерпретирует математически уравнения движения ОУ как любую другую функцию, которую способны подобрать применяемые инструментарию ГМО. То есть этот подход сводит проблему изучения динамики системы к проблеме оптимизации класса функций от информативных параметров, эквивалентного формируемому на глубоких НС (ГЛНС) методом минимизации заданной формы функции потерь предсказания.

1. Изучение точных динамических моделей ОУ необходимо для оптимального управления робототехническими системами. Существующие подходы к моделированию «белого» ящика с использованием аналитической параметризации или моделированию «черного» ящика с использованием ГЛНС могут обладать недостатками от высокого смещения или высокой дисперсии. В результате возникает необходимость в компромиссе в разработке гибкой модели механических систем «серого ящика», которая может беспрепятственно включать предварительные знания там, где они доступны, и обучать универсальные аппроксиматоры представительных (репрезентативных) функций там, где они недоступны. Предлагается, в частности, параметризовать модель ОУ, используя НС для моделирования ее лагранжиана и действующих на нее обобщенных сил. Оба вышеупомянутых подхода имеют ограничения, обобщенные на рис. 1.



Р и с. 1. Компромисс смещения и дисперсии оценки модели ОУ как функция репрезентативности описания модели

F i g. 1. Compromise of bias and variance of the evaluation of the model of the control object as a function of the description representativeness of the model



Предположения, сделанные экспертом в предметной области, могут не учитывать трудно моделируемые эффекты, что приводит к неточностям из-за систематической ошибки модели. С другой стороны, хотя метод «черного ящика» для обучения перепараметризованного функционального класса способен фиксировать явления, присутствующие в обучающих данных, для достижения обобщения часто требуются невероятно большие объемы обучающих данных из-за дисперсии модели. Применение модели «серого ящика» позволяет моделировать области поведения ОУ, для которых описания математической модели точны, в то же время фиксируя динамику системы, которую трудно моделировать, путем обучения можно с помощью ГНС доопределить класс репрезентативных функций из полученных данных. Однако типичные подходы к системному подбору адекватной модели описания динамики с помощью ИНС не позволяют быстро и с заданной точностью использовать экспериментальные данные.

2. Точные модели внешней среды строятся на представлениях о лежащих в ее основе симметриях. В физике эти симметрии соответствуют законам сохранения, например, для энергии и импульса. В модели НС пытаются внести эти симметрии. Класс моделей, называемых гамильтоновыми нейронными сетями (ГНС – HNN – Hamiltonian neural networks), изучает эти инвариантные величины непосредственно из (пиксельных) данных. Дополнительный класс моделей под названием лагранжевы нейронные сети (ЛНС – LNN – Lagrange neural networks) изучает функции Лагранжа непосредственно из данных. Они интересны тем, что, как и ГНС, могут изучать точные законы сохранения, но в отличие от ГНС им не требуются канонические координаты.

При изучении лагранжиана системы, полученной из уравнения Эйлера-Лагранжа, методы исследования имеют некоторые отличия, носят либо более общий характер и фокусируются на физических задачах путем изучения произвольных лагранжианов, или, например, ориентируются на робототехнику и теорию механики твердых тел. При этом являются обобщениями более раннего метода Лагранжа.

Такие модели, как ГНС и гамильтоновы генеративные сети, могут точно так же, как ЛНС, изучать произвольные законы сохранения. Однако они имеют определенные ограничения, такие как невозможность обучения по произвольным координатам, и поэтому требуют, чтобы они были «каноническими». Это означает, что структура Гамильтона требует определенных координат, таких как импульс, что является более ограничивающим и сложным для ОУ. Таким образом, ЛНС являются предпочтительным выбором для системной идентификации ОУ из-за этого доказанного преимущества перед аналогичными гамильтоновыми архитектурами в дополнение к их способности изучать симметрии и законы сохранения энергии из произвольных данных¹.

Целью физически информированных ГНС является исследование возможностей нового метода системной идентификации

ОУ, который может изучать модель в пространстве состояний на основе смоделированных данных. Таким образом, метод выбора сужен до задачи машинного обучения с учителем, чтобы исследовать его потенциал в понимании динамики ОУ с позиции объяснительного искусственного интеллекта (XAI). Результаты моделирования показывают, что обсуждаемый метод превосходит наивную модель «черного ящика» с точки зрения эффективности данных, а также производительности обучения с подкреплением на основе моделей. При этом проявляется способность метода включать имеющиеся предварительные знания о системе для повышения эффективности применения данных.

Физико-информированное глубокое машинное обучение и Лагранжевы / Гамильтоновы нейронные сети

В оригинальных ФИНС в большинстве решений использовались НС с прямой связью. Однако некоторые исследователи экспериментировали с различными типами НС, чтобы увидеть, как они влияют на общую производительность ФИНС, в частности, с CNN, RNN и GAN, и др. Основные архитектуры, описанные в литературе по ГМО, включают полностью связанные сети прямой связи (FNN, FCNN или FF-DNN), сверточные нейронные сети (CNN) и рекуррентные нейронные сети (RNN). Другие более современные архитектуры включают AutoEncoder (AE), Deep Belief Network (DBN), Generative Adversarial Network (GAN), Bayesian Deep Learning (BDL) и др. [1]-[5].

Рассмотрим некоторые особенности ФИНС на примере моделирования ОДУ. Напомним, что ОДУ – это система дифференциальных уравнений, которая может быть описана как $\dot{z} = f(z, t)$, где $z(t) \in \mathbb{R}^D$ – состояние системы как функция времени t . Функция f называется динамикой системы, поскольку только она определяет, как состояние изменяется во времени. Нейронная сеть f_θ может аппроксимировать динамику f , изучая данные о траектории $z(t)$.

Особенности глубокого обучения гамильтоновых и лагранжевых систем

Возможно делать предсказания $\hat{z}(t)$ путем применения инструментария интегрирования $\hat{z}(t) = \text{ODESolve}(z_0, f_\theta, t)$ и вычислять градиенты функции потерь $L(\theta, z, \hat{z})$ с помощью обычного обратного распространения или сопряженного метода. Для многих физических систем дифференциальные уравнения могут быть получены из одной из двух скалярных функций, гамильтониан H или лагранжиана L , в зависимости от формализма.

Например, дифференциальные уравнения гамильтоновой системы можно записать как

$$\dot{z} = J \nabla H(z), \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I_{D/2} \\ -I_{D/2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{где } I_{D/2} \text{ единичная матрица}$$

¹ *Примечание.* Процесс воспроизведения физически корректной интерпретации данных из законов – это физика исследуемого явления; вывод законов из физических данных – это обучение с учетом физики [3]. Эти два класса работ, представляющих прямые и обратные задачи, находятся в центре исследования. В последние несколько лет наблюдается повышенный интерес к изучению гамильтоновой динамики в рамках глубокого машинного обучения (ГМО). В качестве индуктивного смещения, основанного на физических законах, гамильтонова динамика наделяет НС точным долгосрочным предсказанием, интерпретируемостью и обучением с эффективным использованием данных. Однако гамильтонова динамика также вводит предположения о сохранении или диссипации энергии на входных данных и дополнительные вычислительные затраты.



размерности $\frac{1}{2}D$.

В этом контексте состояние $z = (q, p)$ является описанием пары обобщенных координат $q \in \mathbb{R}^{D/2}$ и обобщенных импульсов $p \in \mathbb{R}^{D/2}$, которые параметризуют состояния системы на многообразии. Дифференциальные уравнения лагранжевой системы можно записать аналогичным образом, за исключением того, что они выражаются только через q и \dot{q} . Обычно \dot{q} и p связаны соотношением $p = M(q)\dot{q}$, обобщением понятия импульса из начал физики, $p = m\dot{x}$, где $M(q)$ – матрица сосредоточенных масс.

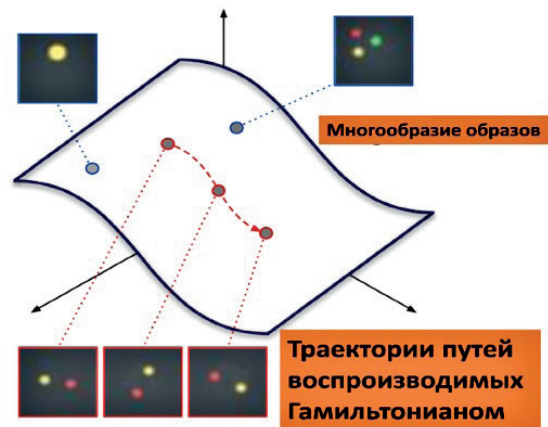
Разрабатываемые подходы предсказывают траектории путем обучения гамильтониана H или лагранжиана L вместо функции f , задающей динамику системы. У рассматриваемого подхода есть две основные особенности: (1) сеть должна знать только скалярную функцию H или L , функциональная форма которой проще, чем динамика f , и (2) интегрирование дифференциальных уравнений, полученных из изученных приближений H_θ или L_θ , приведет к предсказаниям траекторий, которые лучше сохраняют энергию, поскольку истинная динамика, управляемая H или L , сохраняет энергию. Обучение H требует траекторий обучения с состояниями $z = (q, p)$. Однако в реальных системах состояния чаще всего не доступны в форме $z = (q, p)$. Это неудобство можно устранить для большинства систем, поскольку $p = M(q)\dot{q}$, и можем научиться преобразовывать M между \dot{q} и p . Выражение в декартовых координатах линейно по состоянию x и квадратично по p и \dot{x} с постоянной и диагональной матрицей масс с элементами $M_{ii} = m_i$, а выражение в угловых координатах нелинейно по q и имеет недиагональные члены по $M(q)$, которые меняются со временем, так как q изменяется во времени. Более того, самый простой способ вывести гамильтониан и лагранжиан в угловых координатах – сначала записать их в декартовых координатах, а затем записать x через q . Эта разница в функциональной форме еще более резкая в трехмерном пространстве, где декартово выражение идентично, но гамильтониан и лагранжиан существенно сложнее.

Классическая НС ГМО (deep neural network – DNN) состоит из большого числа слоев НС, и каждый слой НС представляет собой нелинейную функцию $f_{\tilde{W}, \tilde{b}}(\tilde{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ с параметрами \tilde{W}, \tilde{b} . В классической ГНС $f_{\tilde{W}, \tilde{b}}(\tilde{x})$ принимает вид $\sigma \circ L_{\tilde{W}, \tilde{b}}$, где $L_{\tilde{W}, \tilde{b}}$ – аффинное преобразование, а σ – нелинейная функция активации. Эффективность ГНС следует из нелинейности функции активации. Без функций активации ГНС будут не чем иным, как аффинными преобразованиями.

Гамильтоновы нейронные сети глубокого машинного обучения

Решения уравнения Гамильтона позволяют предсказывать будущее поведение системы по ее текущему состоянию в фазовом пространстве (то есть ее положению и импульсу для классических ньютоновских систем, а также ее обобщенному положению и импульсу в более широком смысле). Гамильтонова механика воспроизводит динамику с несколькими замечательными свойствами: она гладкая, включает траектории, вдоль которых сохраняются определенные физические величины (симметрии), а их эволюция во времени полностью обратима.

Эти свойства также полезны для систем машинного обучения. Например, описание обратимой во времени динамики состояния внешней среды (мира событий) может быть полезен для активных агентов, пытающихся объяснить, как их действия привели к результатам в событийном мире; восстановление абстрактного низкоразмерного многообразия с траекториями путей, которые сохраняют различные свойства, тесно связанные с нерешенными проблемами в репрезентативном обучении; способность сохранять энергию связана с объяснительным моделированием плотности и генеративными подходами. Следовательно, предлагается сформулировать известную гипотезу многообразия изображений, расширив ее с помощью предположения Гамильтона (показано на рис. 2): естественные изображения лежат на низкоразмерном многообразии, вложенном в многомерное пространство пикселей, а естественные последовательности изображений отслеживают пути на этом многообразии, которые следуют уравнениям абстрактного гамильтониана.



Р и с. 2. Гипотеза гамильтонова многообразия

[Естественные изображения лежат на низкоразмерном многообразии в пространстве пикселей, а естественные последовательности изображений (например, полученные при наблюдении за системой двух тел, как показано красным) соответствуют движению по многообразию в соответствии с гамильтоновой динамикой]

Fig. 2. The Hamiltonian manifold hypothesis [Natural images lie on a low-dimensional manifold in pixel space, and natural sequences of images (e.g., observed by a two-body system as shown in red) correspond to motion along the manifold in accordance with Hamiltonian dynamics]

ГНС предлагает способ изучения гамильтоновой динамики на основе данных путем обучения градиентов нейронной сети (полученных обратным распространением) для соответствия производной по времени целевой системы контролируемым образом. В частности, ГНС изучает дифференцируемую функцию $H(q, p)$, которая отображает состояние системы (ее положение, q , и импульс, p) в скалярную величину, интерпретируемую как гамильтониан системы [13]-[15]. Эта модель обучена так, чтобы $H(p, q)$ удовлетворяло уравнению Гамильтона путем минимизации



$$L_{HNN} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{dq}{dt} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{dp}{dt} \right)^2 \right], \quad (1)$$

где производные $\frac{\partial H}{\partial q}$ и $\frac{\partial H}{\partial p}$ вычисляются обратным распространением ошибки.

Следовательно, эта процедура обучения наиболее непосредственно применима, когда известны истинное пространство состояний (в канонических координатах) и его производные по времени. Соответственно, в большинстве экспериментов, гамильтониан был изучен непосредственно из пространства истинного состояния, а не из наблюдений. Вместо создания гамильтониана предлагается параметризовать его с НС, а затем изучать непосредственно из наблюдаемых данных. Хотя декартовы координаты уменьшают функциональную сложность гамильтониана и лагранжиана, они не кодируют ограничения системы. Поэтому необходимо применять ограничения как для гамильтоновой динамики, так и для лагранжевой динамики, используя множители Лагранжа.

Пример: *Гамильтонова механика с явными ограничениями*. Динамика гамильтоновой системы может быть получена путем нахождения стационарной точки функционала действия

$$S[z] = \int L(z(t)) dt = - \int \left[\frac{1}{2} z(t)^T J \dot{z}(t) + H(z) \right] dt \quad (2)$$

как в лагранжевой механике. Выполнение необходимого условия стационарной точки $\delta S = 0$ дает дифференциальное уравнение системы $\dot{z} = J \nabla H(z)$. Мы можем ввести ограничения явно, превратив эту процедуру в задачу оптимизации с ограничениями с помощью множителей Лагранжа.

Предположим, что заданы C голономные ограничения, собранные в вектор $\Phi(x) = 0$. Мы можем дифференцировать ограничения, чтобы сформировать дополнительные C ограничения, которые зависят от импульса p , так как $0 = \dot{\Phi} = (D\Phi) \nabla_p H$, где $D\Phi$ – якобиан относительно x .

Если сгруппировать Φ и $\dot{\Phi}$, то получим $0 = \Psi(z) = (\Phi, \dot{\Phi}) \in \mathbb{R}^{2C}$ как набор ограничений $2C$, которые мы должны применять при нахождении стационарной точки S . Мы можем обеспечить эти ограничения, дополнив состояние z зависящим от времени множителем Лагранжа $\lambda(t) \in \mathbb{R}^{2C}$ в виде дополнительного

действия $S[z, \lambda] = - \int \left[\frac{1}{2} z(t)^T J \dot{z}(t) + H(z) + \Psi(z)^T \lambda \right] dt$. Вы-

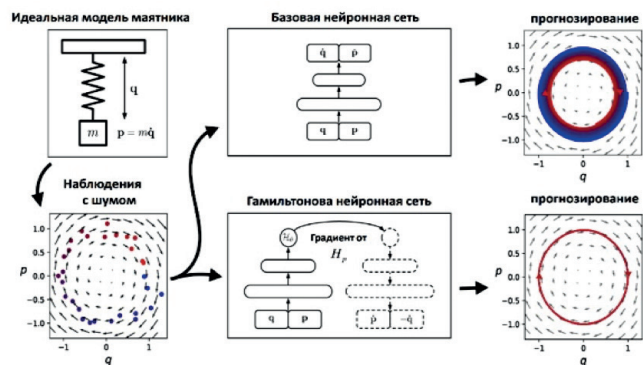
полнение условия $\delta S = 0$ дает дифференциальные уравнения, описывающие состояние z при явных ограничениях $\Phi(x) = 0$: $\dot{z} = J \left[\nabla H(z) + (D\Psi(z))^T \lambda \right]$, где $D\Psi$ – якобиан относительно z . При этом каждая строка j матрицы $D\Psi$ является градиентом ограничения $\Psi(z)_j$ и ортогональна поверхности ограничения, определяемой условием $\Psi(z)_j = 0$. Умножение слева на $(D\Psi)$ проецирует динамику вдоль данных ортогональных направлений и дает условие $(D\Psi) \dot{z} = d\Psi / dt = 0$, которое затем можно использовать для получения $\lambda = - \left[(D\Psi) J (D\Psi)^T \right]^{-1} (D\Psi) J \nabla H$. Определение проекционной матрицы

$$P := I - J (D\Psi)^T \left[(D\Psi) J (D\Psi)^T \right]^{-1} (D\Psi),$$

удовлетворяющей условию $P^2 = P$, уравнение ограниченной динамики позволяет переписать как $\dot{z} = P(z) J \nabla H(z)$. (3)

Уравнение (3) можно интерпретировать как проекцию исходной динамики $\dot{z} = J \nabla H(z)$ на поверхность ограничений, определяемую $\Psi(x) = 0$, в соответствии с гамильтоновой структурой.

На рис. 3 показан в качестве примера результат обучения ГНС на системе маятника «масса-пружина».



Р и с. 3. Изучение гамильтониана системы масса-пружина [6]

[Переменные q и p соответствуют координатам положения и импульса]

Fig.3. Study of the Hamiltonian of the mass-spring system [6]

[The variables q and p correspond to the position and momentum generalized coordinates]

В отличие от базовой модели, ГНС обучает систему сохранять подобное энергии количество. Поскольку трения нет, внутренняя спираль базовой линии возникает из-за ошибок модели. Для сравнения, ГНС учится точно сохранять количество, аналогичное полной энергии [6]-[8].

Поскольку цель состоит в исследовании динамики системы с помощью НС, то самый простой способ сделать это в виде предсказания следующего состояния системы на основе текущего.

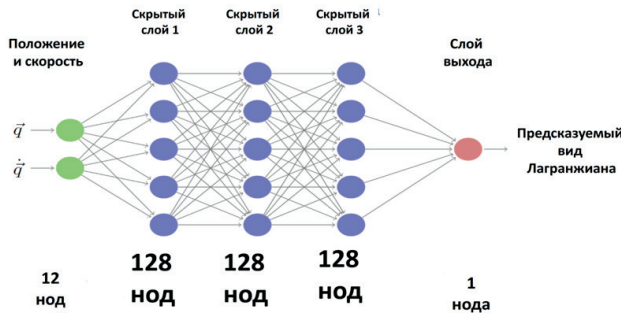
Лагранжевы нейронные сети ГМО

Лагранжевы нейронные сети – ЛНС (Lagrange neural networks – LNN), которые могут параметризовать произвольные лагранжианы с использованием НС. Поэтому ЛНС основаны на физико-информированном методе обучения при изучении динамики пространства состояний ОУ.

В отличие от моделей, которые изучают гамильтонианы, ЛНС не требуют канонических координат и поэтому хорошо работают в ситуациях, когда канонические импульсы неизвестны или их трудно вычислить. Входными данными сети являются положение и угловая ориентация с соответствующими производными по времени. Результатом является лагранжиан системы, который используется для получения ускорения² (рис. 4).

² *Примечание.* Подход протестирован на моделировании поведения модели двойного маятника и релятивистской частицы, демонстрируя сохранение энергии и моделирование относительности без канонических координат. Традиционный подход приводит к диссипации и гамильтонов подход во многих случаях терпит неудачу [9].





Р и с. 4. Иллюстрация лагранжевой нейронной сети
F i g 4. Lagrangian Neural Network Illustration

НС находят закономерности в зашумленных и многомерных данных. Частично успех применения НС коренится в «глубоких априорных планах», которые включают в себя жестко закодированные трансляционные инвариантности (например, сверточные фильтры), продуманный архитектурный выбор (например, уровни самоконтроля) и хорошо обусловленные ландшафты оптимизации (например, пакетная нормализация). Тем не менее, несмотря на их способность конкурировать с людьми в решении сложных задач, этим моделям не хватает многих базовых интуитивных представлений о динамике физического мира. В то время как человек-оператор может быстро сделать вывод, что мяч, брошенный вверх, вернется в его руку примерно с той же скоростью, НС может не воспринимать эту абстракцию как обучающую выборку, даже просмотрев тысячи примеров.

Основная проблема с моделями НС заключается в том, что с помощью НС пытаются изучить основные симметрии и законы сохранения. Одним из решений этой проблемы является разработка НС, способных изучать произвольные законы сохранения. Это было основной мотивацией создания ГНС и гамилтоновы генеративные сети. Это оба типа дифференциальных уравнений, моделируемых НС, или «нейронными ОДУ».

В физике традиционно записывают аналитическое выражение для лагранжиана L , а затем символически разлагают уравнение Эйлера-Лагранжа в систему дифференциальных уравнений (см. Приложение). Однако, поскольку L теперь является черным ящиком, аналитического разложения уравнения Эйлера-Лагранжа быть не может. Но существует возможность вывести числовое выражение для динамики системы. Перепишем для этого уравнение Эйлера-Лагранжа в векторизованной форме как $\frac{d}{dt} \nabla_{\dot{q}} L = \nabla_q L$, где $(\nabla_{\dot{q}})_i = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}$.

Затем мы можем использовать правило цепочки, чтобы разложить производную по времени $\frac{d}{dt}$ через градиент лагранжиана, что даст два новых члена,

один с \ddot{q} , а другой с \dot{q} : $(\nabla_{\dot{q}} \nabla_{\dot{q}}^T L) \ddot{q} + (\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^T L) \dot{q} = \nabla_q L$. Здесь данные произведения ∇ – операторов являются матрицами, например, $(\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^T L)_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial \dot{q}_i}$. Теперь можно использовать обратную матрицу для поиска решения относительно \ddot{q} :

$$\ddot{q} = (\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^T L)^{-1} [\nabla_q L - (\nabla_q \nabla_{\dot{q}}^T L) \dot{q}] \quad (4)$$

Для заданного набора координат $x_t = (q_t, \dot{q}_t)$ теперь есть метод вычисления \ddot{q}_t по лагранжиану черного ящика, который

можно интегрировать для определения динамики системы. Функцию потерь можно определить через расхождение между \ddot{x}_t^L и \ddot{x}_t^{true} .

Другими словами, уравнение (4) говорит, что если предоставлены координаты состояния q и скорости \dot{q} системы, то можем численно повторить ускорение системы \ddot{q} , взяв операцию вычисления Гессiana серого ящика обучающей модели Лагранжиана L .

Параметризация системного Лагранжиана НС (см. рис. 4), которая предсказывает вид лагранжиана, а затем получает значение ускорения в соответствии с уравнением (4), позволяет сформулировать параметры НС. Если θ_L – это веса и смещения всей ЛНС на рис. 4, посредством обратного распространения параметры будут обновлены таким образом, чтобы минимизировать потери (MSE – mean square error – минимум среднеквадратичной ошибки) в соответствии с уравнением

$$\min_{\theta_L} \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left\| \ddot{q}_k = (\nabla_{\dot{q}_k} \nabla_{\dot{q}_k}^T L)^{-1} [\nabla_{q_k} L - (\nabla_{q_k} \nabla_{\dot{q}_k}^T L) \dot{q}_k] \right\|_2^2.$$

Пока описанная ЛНС изучает только «статическую» часть динамики системы и, таким образом, предполагает, что система сохраняет свою энергию в соответствии с уравнениями Эйлера-Лагранжа. Можно обобщить модель (4) для произвольных неконсервативных сил F , таких как управляющие воздействия u и демпфирующие члены $D(v)$, действующие на систему. Ускорение, полученное в (4), больше не сможет предсказать правильное ускорение, когда на систему действуют неконсервативные силы. Это связано с тем, что эти силы нарушают предположение о сохранении энергии системы в уравнении Эйлера-Лагранжа [16]-[19].

В отличие от предыдущих подходов, метод [9]-[11] не ограничивает функциональную форму изученных энергий и позволяет создавать энергосберегающие модели для различных задач (рис. 5).

Рассмотрим частные примеры применения Лагранжиана для описания динамики физических систем, рассмотренной на рис. 5.

Примеры

Рассмотрим частные примеры применения ЛНС для описания динамики физических систем, рассмотренной на рис. 5.

1. Маятник с одной степенью свободы – осциллятор Ван дер Поля

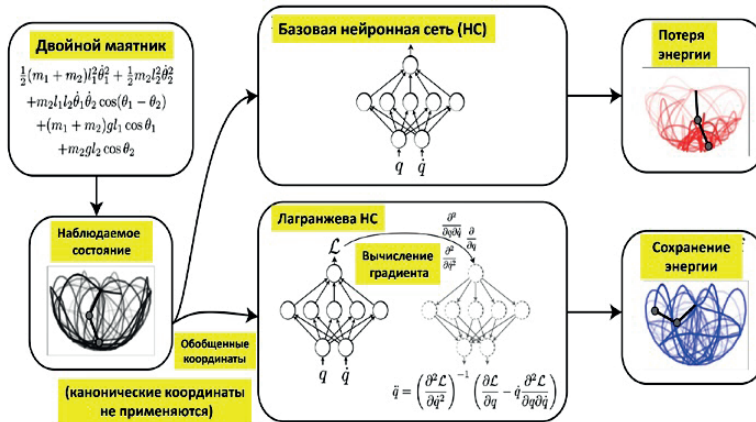
Динамика Ван дер Поля описывает колебательное поведение класса нелинейных уравнений, первоначально описывающих колебательные контуры с полупроводниками, в виде:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} - \mu(1-x^2) \frac{dx}{dt} + x = F(t), \quad (5)$$

где $F(t)$ – сила управления, $x(t)$ называется состоянием, $\dot{x}(t)$ – скорость, а $\ddot{x}(t)$ – ускорение; μ – скалярный параметр, указывающий на нелинейность и силу демпфирования. Уравнение (5) демонстрирует колебательное поведение, но с непостоянной амплитудой, представляя инвариантный набор траекторий, называемый «предельным циклом». Траектории системы сходятся к этим инвариантным орбитам при любых начальных условиях, как показано на рис. 6а: при наличии шести различных начальных точек все фазовые траектории сходятся к непостоянному предельному циклу с изменяющейся скоростью относительно



их положений, что указыва



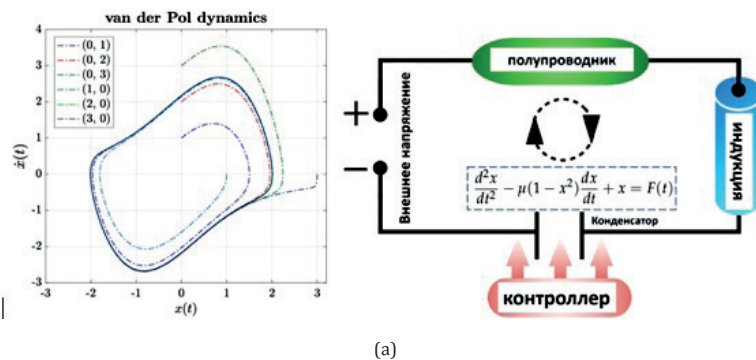
Р и с. 5. Иллюстрация применения Лагранжиана для описания динамики физических систем, таких как двойной маятник (черный)

[Нейронные сети (НС) моделируют динамику в течение длительных периодов времени из-за их неспособности сохранять энергию (красный).

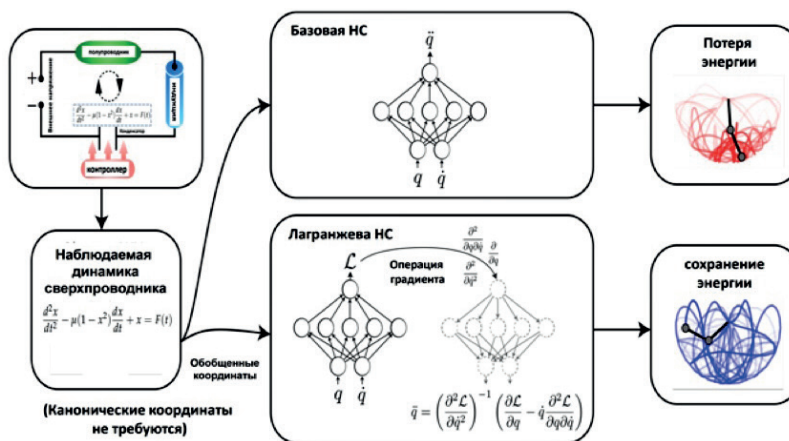
Исследование произвольных лагранжианов с помощью НС и априорной информации о физической природе исследуемой динамики приведено (синий)]

F i g. 5. Illustration of the application of the Lagrangian to describe the dynamics of physical systems, such as a double pendulum (black)

[Neural networks (NN) simulate dynamics over long periods of time due to their inability to conserve energy (red) and a priori information about the physical nature of the dynamics under study is given (blue)]



(а)



(б)

Р и с. 6. Фазовый портрет для нелинейного уравнения Ван-дер-Поля при $\mu = 1$ (а); Схематическая диаграмма для платформы PHYSICS-INFORMED DEEP OPERATOR CONTROL (PIDOC) на основе структуры ФИНС (б)

F i g. 6. Phase portrait for the nonlinear Van der Pol equation at $\mu = 1$ (а); Schematic diagram for the PHYSICS-INFORMED DEEP OPERATOR CONTROL (PIDOC) platform based on the structure of PINN (б)



Устойчивость нелинейной фазы снижается, так как система «заперта» в наборе до тех пор, пока управляющие сигналы не прекратят действовать, что указывает на устойчивость самой внутренней динамики.

Представим базовую настройку сети PIDOC, используя ФИНС в качестве начального положения (обозначенного I) и управляющего сигнала (обозначенного D , что означает желаемую траекторию), закодированного в функции потерь ФИНС для точного управления.

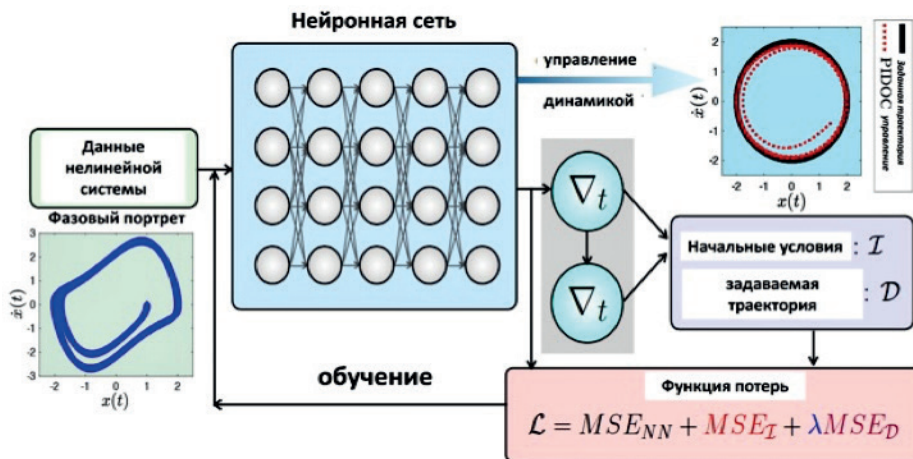
1. Глубокое машинное обучение ФИНС с управлением. Структурно PIDOC управляет нелинейными системами на основе «обучения» хаотическими данными для вывода прогноза в качестве управления; это обеспечивается глубокой нейронной сетью (ГЛНС). Для системы Ван дер Поля ГНС формулируется как: $x_{pred} = (K_L \circ \sigma_L \circ \dots \circ K_1 \circ \sigma_1 \circ K_0)t$, где ГЛНС выводит желаемую траекторию x_{pred} с учетом ввода определенного временного ряда t . K_1, K_2, \dots, K_L – линейные слои; $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L$ – функции активации, где PIDOC использует функции активации \tanh . Для PIDOC НС требуется время t в качестве входного слоя K_0 для передачи через $(L - 1)$ -е скрытые слои для генерации выходного x_{pred} через выходной слой K_L , контролируемого

из хаотических данных системы x_{train} Ван-дер-Поля. Здесь пусть $N^L \equiv (K_L \circ \sigma_L \circ \dots \circ K_1 \circ \sigma_1 \circ K_0)$ обозначает L -й слой НС. ГЛНС, соответствующая уравнению x_{pred} , обычно представляет собой комбинацию трех слоев: входного, скрытого и выходного. Именно здесь соединяются нейроны, и это широко известно как НС с прямой связью, которая определяется рекурсивно как

- Входной слой: $K_0(t) = t \in \mathbb{R}^{d_{in}}$
- Внутренний (скрытый) слой:

$$K_L(t) = \sigma(w_L K_{L-1}(t) + b_L) \in \mathbb{R}^{K^L}, \text{ for } 1 \leq L \leq L - 1 \quad (6)$$

- Выходной слой: $K_L(t) = w_L K_{L-1} + b_L \in \mathbb{R}^{d_{out}}, (x_{pred} \equiv K_L(t))$
- Для НС $N^L(t): \mathbb{R}^{d_{in}} \rightarrow \mathbb{R}^{d_{out}}$ входной временной ряд t передается на линейный входной слой K_0 вперед через скрытые слои из линейной модели с w_L в качестве весов и b_L в качестве смещений, активированных с помощью функции активации \tanh . Это генерирует выходные данные через K_L для прогнозов НС x_{pred} и также может быть интерпретировано как контролируемая динамика. Видно, что в L -м слое есть K^L – нейроны ($K^0 = d_{in}$ & $K^L = d_{out}$); веса и смещения обозначаются $w_L \in \mathbb{R}^{K^L \times K^{L-1}}$ и $b_L \in \mathbb{R}^{K^L}$. Визуализация НС показана в синем поле на рис. 7.



Р и с. 7. Схематическая диаграмма платформы PIDOC на основе ФИНС

[Системные данные нелинейного осциллятора Ван-дер-Поля вводятся в структуру глубокого обучения, поскольку автоматическая дифференциация может кодировать физическую информацию, как в фиолетовом поле. Закодированная информация далее направляется в функцию потерь, поскольку множитель Лангранжа λ может увеличивать управляющий сигнал, который обеспечивает обратную связь со схемой глубокого обучения для изучения динамики и, таким образом, может выводить идеальную динамику]

F i g.7. Schematic diagram of the APIDOC platform based on PINN

[The system data of the nonlinear Van der Pol oscillator is introduced into the deep learning structure, since automatic differentiation can encode physical information, as in the purple field. The encoded information is further sent to the loss function, since the Lagrange multiplier λ can increase the control signal, which provides feedback to the deep learning scheme for studying dynamics and, thus, can output ideal dynamics]

Наша цель – контролировать нестационарное состояние колебательной динамики, изучая исходное уравнение Ван-дер-Поля. В этом случае отсутствует ошибка линеаризации, как в традиционных методах, таких как ПИ- или ПИД-регуляторы, а также не накапливаются ошибки в интеграторе ПИД-регулятора. Кроме того, управление PIDOC на основе НС способно фиксировать нелинейные хаотические характеристики непосредственно из данных системы Ван-дер-Поля (через конденсатор на рис. 6а). Оптимизация минимизации потерь является

внутренним процессом обратной связи для структуры управления, поскольку ошибки уменьшаются на каждой итерации, в то время как сигнал управления с прямой связью находится с использованием прогнозов обучения НС. Для управления системой классическим подходом вводится синусоидальная или другой треугольной функции путем изменения $F(t)$ в уравнении движения. Между тем, такой сигнал, как внешнее наблюдение, добавленное в PIDOC, применяется в данном подходе. Изображение и эмуляция системы, как показано на рис. 6, до-



стигаются с помощью моделирования системы Ван-дер-Поля, которая генерирует нелинейные данные, которые подаются в PIDOC для управления. В классическом определении НС такие данные рассматриваются как обучающие данные, используемые НС, чтобы помочь ей «обучаться» и «предсказывать». В формулировке PIDOC определяется задача машинного обучения с учителем, где обучение НС осуществляется посредством наблюдения за внешними обучающими данными в качестве формулировки для минимизации функции потерь, что означает, что НС может захватывать структуры данных посредством этого процесса оптимизации, в то время как в традиционных подходах к НС функция потерь L обычно отражает различия (ошибки) между предсказаниями НС и обучающими данными. Пусть $L = L(t, p)$ обозначает функцию потерь, где t – входной временной ряд, а p – вектор параметров, содержащий формации \mathbf{I} , \mathbf{D} и НС. Если никакие внешние ограничения или границы не применяются, проблема оптимизации, следовательно, принимает форму: $\min_{p \in \mathcal{P}} L(t, p)$. Минимизация L требует рекурсивных итераций по НС, как в уравнении (6). Информация, закодированная в L , уменьшается во время итераций с учетом методов оптимизации. Оптимизация выполняется по циклу итераций от синего прямоугольника (НС) к фиолетовому прямоугольнику (\mathbf{I} и \mathbf{D}) и к красному прямоугольнику (L), как показано на рис. 7. Максимальное количество итераций установлено равным $2 \cdot 10^5$. В формулировке PIDOC, функция потерь L рассчитывается на основе среднеквадратичных ошибок закодированной информации.

Физико-информированное управление. Реализация управляющих сигналов обеспечивается за счет физической информации, содержащейся в функции потерь и имитирующей стратегию ФИНС, но вместо этого направленной на выполнение команды на обучающих данных, чтобы настроить систему на устойчивую фазу. Формулировка функции потерь включает среднеквадратичные ошибки (MSEs) генерации поколения НС MSE_{HC} , начальных условий MSE_1 и желаемой траектории MSE_D , умноженные на множитель Лагранжа λ , чтобы увеличить влияние управляющего сигнала: $L = MSE_{NN} + MSE_1 + MSE_D$, где ошибки генерации НС MSE_{NN} вычисляются как MSE для разницы между обучающими данными x_{train} и предсказанным НС выходным значением x_{pred} :

$$MSE_{NN} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_{train} - x_{pred}|^2.$$

Начальная потеря позиции MSE_1 вычисляется как MSE между заданными начальными условиями \mathbf{D} с предсказаниями системы x_{pred} в начале: $MSE_1 := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_{pred}^0 - x_D^0|^2$,

где x_{pred}^0 обозначает начальную позицию (0-е место в массиве в Python) предсказания НС; x_D^0 обозначает начальное положение желаемой траектории.

Потери сигнала управления MSE_D представляют собой среднеквадратичную ошибку разностей между производными нулевого и второго порядка положения между прогнозами НС (выходными данными) и желаемыми траекториями управления. Таким образом, MSE_D накладывает желаемый контроль на PIDOC:

$$MSE_D := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{d^2 x_D}{dt^2} - \frac{d^2 x_{pred}}{dt^2} \right) + (x_D - x_{pred})^2.$$

Здесь MSE_D включает управление, а множитель λ позволяет настроить вес сигнала. Задача оптимизации, сформулированная, следовательно, может рассматриваться как многокритериальная оптимизация на основе градиента, поскольку цель управления может быть настроена с помощью λ . В частности, метод BFGS с ограниченной памятью широко применяется для крупномасштабной оптимизации без ограничений. Классический подход к управлению использует прямоугольную или треугольную функцию в качестве сигналов. В частности, для схемных систем применение синусоидальной волны является обычной практикой. Здесь, для приложений PIDOC, также применили синусоидальную волну, умноженную на регулируемый множитель Λ , чтобы контролировать амплитуду фазы: $x_D(t) = \Lambda \sin t$. При заданном x_D ожидается, что выходной фазовый портрет (диаграмма $[x(t), \dot{x}(t)]$) будет иметь круговую траекторию.

Однако, чтобы настроить PIDOC с требуемой амплитудой траектории Λ , следует изменить уравнение так, чтобы потери НС содержали информацию об амплитуде траектории с теми же обучающими данными:

$$MSE_{NN} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| x_{train} - \frac{x_{pred}}{\Lambda} \right|^2.$$

Анализ поведения системы. Систематическое поведение проверяется на основе фазового портрета, временной схемы положения $x(t)$ и ускорения $\ddot{x}(t)$, как показано на рис. 8.

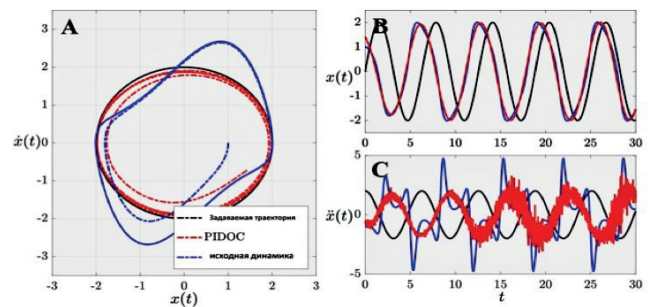


Рис. 8. Поведение системы при использовании PIDOC для управления динамикой Ван-дер-Поля применительно к задаче эталонного тестирования. (А) фазовый портрет желаемой траектории \mathbf{D} , сигнал, управляемый PIDOC, и собственная динамика Ван-дер-Поля. (В) График положения $x(t)$ в зависимости от времени t . (С) График ускорения $\ddot{x}(t)$ в зависимости от времени t

Fig. 8. The behavior of the system when using PIDOC to control the dynamics of Van der Pol in relation to the task of benchmark testing. (A) A phase portrait of the desired trajectory \mathbf{D} , a PIDOC-controlled signal, and Van der Pol's own dynamics. (B) Graph of position $x(t)$ as a function of time t . (C) Graph of acceleration $\ddot{x}(t)$ as a function of time t

Из рис. 8А видно, что PIDOC успешно реализует управление переводом в желаемую траекторию, как показано красной пунктирной линией, сходящейся к окружности $\Lambda = 2$, устраняя хаотическое поведение системы Ван-дер-Поля, показанное синей пунктирной линией. Однако на рис. 8В видно, что схема управления PIDOC, показанная красной линией, демонстрирует фазовую разницу с требуемым маршрутом, показанным черной линией. На рис. 8С также видно, что схема, управляе-



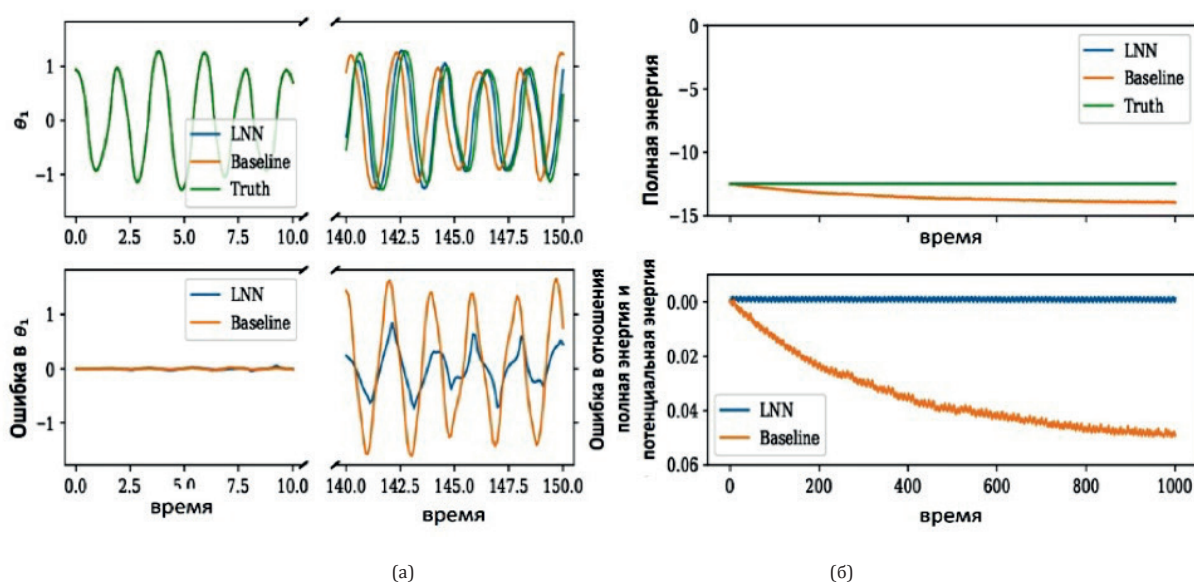
мая PIDOC, демонстрирует колебательный характер, как показано красной линией.

Из рис. 8 можно сделать вывод о трех характеристиках управления PIDOC: (1) PIDOC успешно реализовал управление для управления поведением системы на основе \mathbf{D} ; (2) Динамика, управляемая PIDOC, имеет отставание по фазе от желаемых сигналов; (3) ускорение $\ddot{x}(t)$ имеет флуктуационный характер. Разность фаз (рис. 8В) связана с тем, что PIDOC стремится следовать заданным начальным позициям, которые закодированы. Стохастичность, наблюдаемая на рис. 8С, может быть связана как со стохастическим характером обучения НС, так и с числовым дифференциалом положения $x(t)$. Веса W_L рандомизируются и обновляются на протяжении итераций, чтобы аппроксимировать нелинейные данные, данные для обучения. В то время как они кажутся гладкими для аппроксимации $x(t)$ первого порядка на рис. 8В, члены более высокого порядка в ускорении $\ddot{x}(t)$ увеличивают стохастичность сигнала [12].

Более того, в формулировке PIDOC, взятой из ФИНС, автоматическая дифференциация также выявляет ошибки, такие как ошибки, закодированные в функции потерь L . Оба замечания могут рассматриваться также как факторы, объясняющие колебания на рис. 8С.

2. Двойной маятник

Эффективная реализация (1) представляет собой сложную техническую задачу. Чтобы обучить эту прямую модель, необходимо вычислить обратный гессиан $(\nabla_q \nabla_q^T L)^{-1}$ (используется псевдо-обратный, чтобы избежать потенциальных сингулярных матриц) НС, а затем выполнить обратное распространение. Обратная матрица масштабируется как $O(d^3)$ с числом координат d . В результате получено, что LNN и базовый уровень НС приводят к окончательным потерям $7:3$ и $7:4 \cdot 10^{-2}$ соответственно (рис. 9).



Р и с. 9. Результаты моделирования двойного маятника (а) угловая ошибка; и (б) ошибка в энергии

[Для базовых моделей, моделей HNN и LNN использовали четырехслойную модель НС с 500 скрытыми единицами, затухающей скоростью обучения, начиная с 10^{-3} , и размером пакета 32. Приняты единичные масса и длина, учитывались мгновенные ускорения при более 600 000 случайных начальных условий]

Fig. 9. Simulation results of a double pendulum (a) angular error; and (b) error in energy

[For basic models, models HNN and LNN, a four-layer NN model with 500 hidden units, a decaying learning rate starting from 10^{-3} , and a packet size of 32 was used. Unit mass and length were assumed, instantaneous accelerations were taken into account at more than 600,000 random initial conditions]

Из рис. 9 а видно, что ЛНС и базовая модель одинаково работают при моделировании динамики маятника за короткие периоды времени. Однако, рис. 9 б демонстрирует результат расхождения в определении энергии за очень длительный период времени, т.е. модель ЛНС сохраняет полную энергию системы значительно лучше, чем базовая НС.

Более значительная разница была в энергосбережении; ЛНС почти точно сохранял истинную энергию с течением времени, тогда как базовый уровень – нет.

При усреднении по 40 случайным начальным условиям со 100 временными шагами каждое среднее расхождение энергии

между истинной полной энергией и предсказанной составило 8% и 0,4% от максимальной потенциальной энергии для базовой модели и модели ЛНС соответственно [20]-[25].

3. Релятивистская частица в однородном потенциале

Для частицы с массой 1 в гравитационном потенциале g и скорости света $c = 1$ специальная теория относительности дает лагранжиан

$$L = \left(\frac{1}{\sqrt{1-\dot{q}^2}} - 1 \right) + gq$$



Каноническая форма импульса этой системы равна $\frac{\dot{q}}{\sqrt{1-\dot{q}^2}}$.

Это означает, что гамильтонова НС не справится с задачей обучения, если будут заданы простые наблюдаемые, такие как \dot{q} и q . Чтобы проверить эти утверждения, модели ГНС обучались на

системах со случайными начальными условиями и значениями g . На рис. 10 показано, что ГНС не работает без канонических координат, тогда как ЛНС может работать без этих дополнительных априорных знаний и обучается системе так же точно, как ГНС, обученная на канонических координатах.

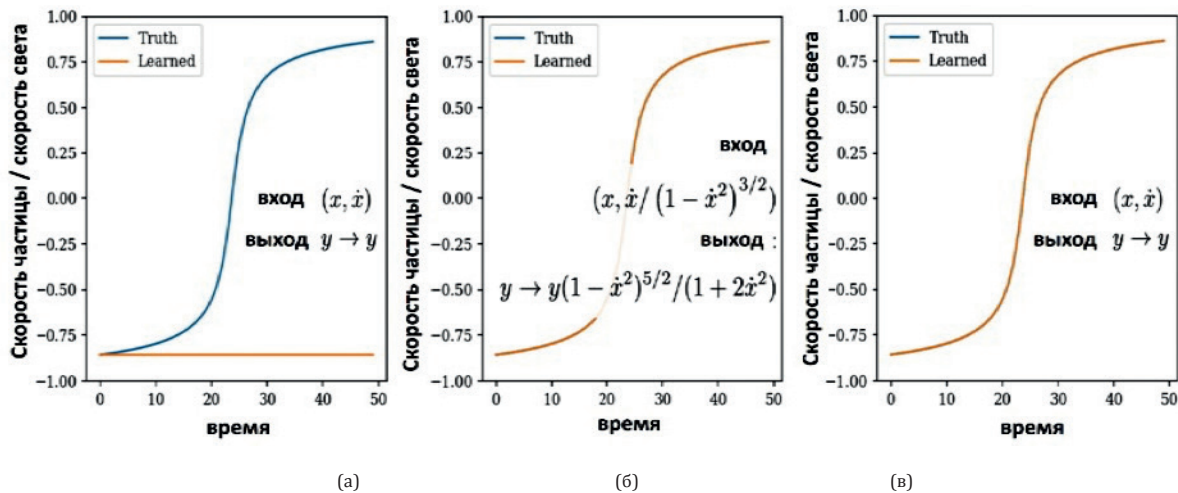


Рис. 10. Результаты моделирования релятивистской частицы: (а) модель ГНС не может обучить динамику из неканонических координат; (б) ГНС успешно обучает, когда заданы канонические координаты; (в) ЛНС обучает точной динамике даже при определении неканонических координат
Fig. 10. Results of modeling a relativistic particle: (a) The HNN model cannot train dynamics from non-canonical coordinates; (b) The HNN successfully teaches when canonical coordinates are given; (c) the LNN teaches accurate dynamics even when determining non-canonical coordinates

Заключение

Разработанные методы ФИНС могут использовать ранее разработанные физические ядра, которые доказали свою способность моделировать определенные режимы поведения ОУ. Можно использовать слои нейронных сетей, чтобы компенсировать ограничения таких основанных на физике ядер путем моделирования частей системы, которые не полностью изучены. Это простой и практичный способ охарактеризовать неопределенность формы модели. Проиллюстрирован случай, когда слои, основанные на физике, и слои, управляемые данными, соединены последовательно. Окончательный дизайн архитектуры нейронной сети зависит от проблемы. Возможно комбинировать слои, основанные на физике, и уровни, управляемые данными, образуя сложные архитектуры (смешивающие последовательные, параллельные, мостовые и другие).

Приложение 1. Взаимосвязь корпускулярной и волновой моделей аналитической механики

В механике сплошных сред различают лагранжев и эйлеров подходы описания сред³. При лагранжевом подходе к описанию среды следят за движением каждой частицы среды. Причем ко-

ординаты частицы в каждый момент времени зависят от ее начальных координат (т. е. момент $t=0$) и данного момента времени. При эйлеровом описании движения среды наблюдают за тем, что происходит в данном элементе объема 3-мерного пространства. В этом случае наблюдают за различными частицами, попадающими в данный элемент объема в разные моменты времени. Таким образом, при лагранжевом описании скорость каждой частицы среды является функцией ее начальных координат и времени. При эйлеровом описании скорость движения каждой частицы среды является функцией времени и координат той точки среды, в которой она в данный момент находится. То же самое относится ко всем другим механическим функциям, описывающим движение среды. Обсудим предварительно поучительный пример взаимосвязи подходов к построению моделей описания движения системы, следуя работе⁴.

Пример: *Вывод уравнения Лагранжа из уравнения Ньютона*. Рассмотрим движение частицы в форме механики Ньютона. Уравнение движения частицы, согласно второму закону Ньютона (или следуя методу проекции действующих на материальное тело сил), имеет вид: $m \frac{d^2 y}{dt^2} = \sum_i F_i = f - mg$,

где f – внешняя сила, а mg – сила гравитации, действующая на частицу. Преобразуем данное уравнение к виду

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(m \frac{dy}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(m \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} \dot{y}^2 \right] \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{y}} T \right),$$

³ Hamill P. A Student's Guide to Lagrangians and Hamiltonians. Cambridge University Press, UK, 2014. 181 p.

⁴ Зрелов П. В., Кореньков В. В., Тятюшкина О. Ю., Ульянов С. В. Основы применения квантовых сквозных ИТ в робототехнике и интеллектуальном когнитивном управлении: стохастическая механика, квантовая информационная физика и информационная геометрия [Электронный ресурс] // Системный анализ в науке и образовании. 2021. № 2. С. 83-117. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=46383487> (дата обращения: 11.06.2022).



где $T = \frac{1}{2}m\dot{y}^2$ – кинетическая энергия частицы.

В свою очередь, имеем $mg = \frac{\partial}{\partial y}[mgy] = \frac{\partial}{\partial y}U$ – потенциальная энергия частицы. Тогда уравнение Ньютона можно переписать в виде уравнения Лагранжа как $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{y}}L\right) - \frac{\partial}{\partial y}L = f'$,

где Лагранжиан L имеет традиционную форму $L = T - U$.

Рассмотрим теперь движение частицы в потенциальном поле и Лагранжианом вида $L = T - U = \frac{1}{2}|\dot{q}|^2 - U(q)$. В этом случае из уравнения Лагранжа имеем

$$0 = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}}L\right) - \frac{\partial}{\partial q}L = \frac{d}{dt}\dot{q} - \frac{\partial}{\partial q}U(q).$$

Таким образом, имеем уравнение $\ddot{q} = \nabla_q U(q)$, т.е. закон Ньютона, следующий из уравнения Лагранжа.

Пример: Вывод уравнения Гамильтона Якоби из уравнения Ньютона. Запишем уравнение движения в форме Ньютона в следующем эквивалентном виде

$$m\frac{d}{dt}\dot{x} + \nabla U(x,t) = 0, \quad \nabla U = \frac{\partial}{\partial x}U(x,t) \quad (П1)$$

где $U(x,t)$ – потенциальное поле, градиент которого пропорционален силовому полю. Согласно векторному анализу, полная производная векторной функции имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dt}f(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}f(x,t) + \dot{x} \cdot \nabla f(x,t). \quad (П2)$$

Таким образом, полная производная состоит из двух переменных слагаемых: первое слагаемое характеризует изменение функции $\delta(x,t)$ в данном месте пространства; второе слагаемое характеризует изменение функции $\delta(x,t)$, происходящее благодаря тому, что рассматриваемая частица переносится в пространстве из одной точки в другую. Второе слагаемое $\dot{x} \cdot \nabla \delta(x,t)$ называют поэтому конвективным членом, так как оно возникает в связи с переносом (конвекцией) частицы жидкости. Дальнейшее обобщение такого подхода заключается в построении моделей параллельного переноса в римановом пространстве при случайных возмущениях и рассмотрено в работе⁵. Из векторного анализа известно также следующее соотношение:

$$\nabla(a \cdot b) = (a \cdot \nabla)b + (b \cdot \nabla)a + a \times [\nabla \times b] + b \times [\nabla \times a]. \quad (П3)$$

Тогда из (П2) и (П3) следует

$$\frac{d}{dt}\delta(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}\delta(x,t) + \frac{1}{2}\nabla(\dot{x}^2(x,t) - \delta(x,t)) \times [\nabla \times \delta(x,t)]. \quad (П4)$$

Подставляя (П4) уравнение в исходное уравнение движения (П1), получим

$$m\frac{\partial}{\partial t}v(x,t) + \frac{m}{2}\nabla[v^2(x,t)] - mv(x,t) \times [\nabla \times v(x,t)] + \nabla U(x,t) = 0. \quad (П5)$$

Ранее было сделано предположение, что векторное поле скоростей порождается скалярной функцией с помощью соотношения в виде

$$\dot{x}(x,t) = \frac{1}{m}\nabla S(x,t). \quad (П6)$$

Подставляя (П6) в (П5), получаем равенство

$$\nabla \left\{ \frac{\partial}{\partial t}S(x,t) + \frac{1}{2m}[\nabla S(x,t)]^2 + U(x,t) \right\} = 0. \quad (П7)$$

⁵ Там же.

При выводе (П7) использовалось тождество $\nabla[\nabla S(x,t)] = 0$.

В выражении (П7) в фигурных скобках величина является скаляром, поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t}S(x,t) + \frac{1}{2m}[\nabla S(x,t)]^2 + U(x,t) = 0. \quad (П8)$$

что совпадает с уравнением Гамильтона-Якоби. Таким образом, выражение (П8) есть уравнение Гамильтона-Якоби для системы, описываемой уравнением движения (П1).

Пример. Отметим здесь также случай, когда частица движется в потенциальном поле при наличии диссипативной силы. В этом случае уравнение движения имеет вид:

$$m\frac{dv}{dt} + \nabla U + av = 0.$$

Применяя изложенную методику к данному уравнению, получим

$$\frac{\partial}{\partial t}S(x,t) + \frac{1}{2m}[\nabla S(x,t)]^2 + \frac{a}{m}S(x,t) + U(x,t) = 0. \quad (П9)$$

Уравнение (П9) является уравнением Гамильтона-Якоби с диссипацией [5].

Более общий подход определения неголономного уравнения Гамильтона-Якоби с учетом диссипативных сил рассмотрен во многих работах [6-8]. Из педагогических целей рассмотрим особенности корпускулярного и волнового методов описания моделей классической механики и их взаимосвязь.

Пример: Взаимоотношение уравнений Эйлера-Лагранжа и Гамильтона-Якоби. Рассмотрим эйлеров подход на основе уравнения Гамильтона-Якоби (волновая механика), описывающего механику движения потока частиц, и его связь с лагранжевым методом описания движения частицы на основе уравнения Ньютона (корпускулярная механика).

Так как $\dot{x}(x,t) = \frac{1}{m}\nabla S(x,t)$, то примем функцию Лагранжа в виде $L = T - U = \frac{1}{2}|\nabla S|^2 - U$ ($m = 1$). Тогда, с учетом принципа наименьшего действия $S = \int L dt$ имеем

$$0 = \underbrace{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}}L\right) - \frac{\partial}{\partial q}L}_{\text{уравнение Лагранжа 2-го рода}} = \underbrace{\frac{dS}{dt} + \frac{1}{2}|\nabla S|^2 - U(x)}_{\text{уравнение Гамильтона-Якоби}},$$

т.е. из уравнения Лагранжа получили уравнение Гамильтона-Якоби.

Следовательно, установлена эквивалентность корпускулярной (Лагранжев / Ньютон подходы) и волновой (Гамильтон-Якоби подход) форм представления моделей классической механики. В результате дуализм «корпускула-волна» в классической механике тождественен.

Отметим здесь также случай, когда частица движется в потенциальном поле при наличии диссипативной силы. В этом случае уравнение движения имеет вид:

$$m\frac{dv}{dt} + \nabla U + av = 0.$$

Применяя изложенную методику к данному уравнению, получим $\frac{\partial}{\partial t}S(x,t) + \frac{1}{2m}[\nabla S(x,t)]^2 + \frac{a}{m}S(x,t) + U(x,t) = 0$ (П10)

Уравнение (П10) является уравнением Гамильтона-Якоби с диссипацией [7].



References

- [1] Carleo G., et al. Machine learning and the physical sciences. *Reviews of Modern Physics*. 2019; 91(4):045002. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.045002>
- [2] Thuerey N., et al. Physics-based Deep Learning. *arXiv:2109.05237*. 2022. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2109.05237.pdf> (accessed 19.05.2022). (In Eng.)
- [3] Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*. 2019; 378:686-707. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [4] Karniadakis G.E., Kevrekidis I.G., Lu L., et al. Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*. 2021; 3:423-440. (In Eng.) doi: <http://dx.doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- [5] Cuomo S. et al. Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next. *Journal of Scientific Computing*. 2022; 92(3):88. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2201.05624>
- [6] Greydanus S., Dzamba M., Yosinski J. Hamiltonian Neural Networks. In: Wallach H., Larochelle H., Beygelzimer A., d'Alché-Buc F., Fox E., Garnett R. (eds.) *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2019)*. Vol. 32. Curran Associates, Inc.; 2019. p. 1-11. Available at: <https://proceedings.neurips.cc/paper/2019/file/26cd8ecadce0d4efd6cc8a8725cbd1f8-Paper.pdf> (accessed 19.05.2022). (In Eng.)
- [7] Sosanya A., Greydanus S. Dissipative Hamiltonian Neural Networks: Learning Dissipative and Conservative Dynamics Separately. *arXiv:2201.10085*. 2022. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2201.10085.pdf> (accessed 19.05.2022). (In Eng.)
- [8] Dhulipala S.L.N., Che Y., Shields M.D. Bayesian Inference with Latent Hamiltonian Neural Networks. *arXiv:2208.06120*. 2022. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.06120>
- [9] Cranmer M., Greydanus S., Hoyer S., Battaglia P., Spergel D., Ho S. Lagrangian Neural Networks. *ICLR 2020 Workshop on Integration of Deep Neural Models and Differential Equations*. Addis Ababa, Ethiopia; 2019. Available at: <https://openreview.net/forum?id=iE8tFa4Nq> (accessed 19.05.2022). (In Eng.)
- [10] Liu Z., Wang B., Meng Q., Chen W., Tegmark M., Liu T.-Y. Machine-Learning Non-Conservative Dynamics for New-Physics Detection. *Physical Review E*. 2021; 104:05302. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.05302>
- [11] Meng C., Seo S., Cao D., Griesemer S., Liu Y. When Physics Meets Machine Learning: A Survey of Physics-Informed Machine Learning. *arXiv:2203.16797*. 2022. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2203.16797>
- [12] Zhai H., Sands T. Controlling Chaos in Van Der Pol Dynamics Using Signal-Encoded Deep Learning. *Mathematics*. 2022; 10(3):453. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.3390/math10030453>
- [13] Denman H.H., Buch L.H. Solution of the Hamilton-Jacobi equation for certain dissipative classical mechanical systems. *Journal of Mathematical Physics*. 1973; 14:326-329. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1063/1.1666316>
- [14] Ohsawa T., Bloch A.M. Nonholonomic Hamilton-Jacobi equation and integrability. *Journal of Geometric Mechanics*. 2009; 1(4):461-481. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.3934/jgm.2009.1.461>
- [15] Balseiro P., Marrero J.C., de Diego D.M., Padron E. A unified framework for mechanics: Hamilton-Jacobi equation and applications. *Nonlinearity*. 2010; 23(8):1887-1918. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1088/0951-7715/23/8/006>
- [16] Flannery M.R. d'Alembert-Lagrange analytical dynamics for nonholonomic systems. *Journal of Mathematical Physics*. 2011; 52(3):032705. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1063/1.3559128>
- [17] Litvintseva L.V., Ul'yanov S.V., Ul'yanov S.S. Design of robust knowledge bases of fuzzy controllers for intelligent control of substantially nonlinear dynamic systems: II. A soft computing optimizer and robustness of intelligent control systems. *Journal of Computer and Systems Sciences International*. 2006; 45(5):744-771. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1134/S106423070605008X>
- [18] Valelis C., Anagnostopoulos F.K., Basilakos S., Saridakis E.N. Building healthy Lagrangian theories with machine learning. *International Journal of Modern Physics D*. 2021; 30(11):2150085. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1142/S0218271821500851>
- [19] Waltz D., Buchanan B.G. Automating Science. *Science*. 2009; 324(5923):43-44. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1126/science.1172781>
- [20] Chiu P.-H., Wong J.C., Ooi C., Dao M.H., Ong Y.-S. CAN-PINN: A fast physics-informed neural network based on coupled-automatic-numerical differentiation method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2022; 395:114909. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.114909>
- [21] Fang Z. A High-Efficient Hybrid Physics-Informed Neural Networks Based on Convolutional Neural Network. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. 2022; 33(10):5514-5526. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1109/TNNLS.2021.3070878>
- [22] Rouhani B.D., Mirhoseini A., Koushanfar F. Going deeper than deep learning for massive data analytics under physical constraints. *Proceedings of the Eleventh IEEE/ACM/IFIP International Conference on Hardware/Software Codesign and System Synthesis (CODES '16)*. Association for Computing Machinery, New York, NY, USA; 2016. Article number: 17. p. 1-3. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1145/2968456.2976766>
- [23] Zhang Y. Towards Piecewise-Linear Primal Neural Networks for Optimization and Redundant Robotics. *2006 IEEE International Conference on Networking, Sensing and Control*. IEEE Computer Society; 2006. p. 374-379. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1109/ICNSC.2006.1673175>



- [24] Zhang C., Shafieezadeh A. Simulation-free reliability analysis with active learning and Physics-Informed Neural Network. *Reliability Engineering & System Safety*. 2022; 226:108716. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1016/j.res.2022.108716>
- [25] Dierkes E., Flaßkamp K. Learning Hamiltonian Systems considering System Symmetries in Neural Networks. *IFAC-PapersOnLine*. 2021; 54(19):210-216. (In Eng.) doi: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2021.11.080>

*Поступила 19.05.2022; одобрена после рецензирования 02.07.2022; принята к публикации 10.07.2022.
Submitted 19.05.2022; approved after reviewing 02.07.2022; accepted for publication 10.07.2022.*

Об авторах:

Зрелова Дарья Петровна, стажер-исследователь Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6); аспирант Института системного анализа и управления, ГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна» (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19), **ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7146-2494>**, zrelova@jinr.ru

Ульянов Сергей Викторович, главный научный сотрудник Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6), доктор физико-математических наук, профессор, **ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7409-9531>**, ulyanovsv46_46@mail.ru

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the authors:

Daria P. Zrelova, Research assistant of the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation); Postgraduate Student of the Institute of System Analysis and Control, Dubna State University (19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation), **ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7146-2494>**, zrelova@jinr.ru

Sergey V. Ulyanov, Chief researcher of the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow region, Russian Federation), Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, **ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7409-9531>**, ulyanovsv46_46@mail.ru

All authors have read and approved the final manuscript.

