

ハミルトニアン・ニューラルネットワークの 保存量と計算精度に関する研究

佐藤 哲†

NHN テコラス株式会社 データサイエンスチーム†

1. はじめに

ニューラルネットワークを用いた力学系の研究が盛んであり、とりわけ物理法則をデータから学習する研究が注目されている [1][2][3]。しかし、学習データを用いて訓練したモデルから計算した力学系が、学習データを生成した力学系に対しどの程度の正確性を持つかは分かっていないことが多い。本研究では、力学系のハミルトニアンを保存するように構成されたハミルトニアン・ニューラルネットワークに対し、力学系の時間発展計算に対する大域的な計算誤差について検討する。

2. ニューラルネットワークを用いた力学系の数値計算

ハミルトン力学などにより計算される力学系は、エネルギーや運動量などの保存量を持つ。そのため、数値計算法やニューラルネットワークを用いて力学系の時間発展写像を近似する場合も、保存量や時間反転保存性といった元の力学系の特性を再現する手法が有効であると考えられる。ハミルトニアン・ニューラルネットワーク [1] では、力学系のハミルトニアンと呼ばれるスカラー量を保存するよう写像を学習する。一般に力学系は、位置ベクトルを $x = (p, q)$ 、写像を f として $dx/dt = f(x)$ と定義されるので、ハミルトニアン・ニューラルネットワークの目的は、位置ベクトル x と速度ベクトル dx/dt のペアを教師データとし、写像 f を学習することにある。学習が完了すれば、式を数値的に積分することにより数値計算の初期値問題として位置座標の系列すなわち力学系の軌道を求めることが可能である。写像 f を学習するためには、損失関数 $l = |dp/dt - \hat{dp}/dt|^2 + |dq/dt - \hat{dq}/dt|^2$ を最小化するベクトル $(\hat{dp}/dt, \hat{dq}/dt)$ を求めることになる。しかし、単純に非線形写像を学習させても力学系の特性を再現することは考慮されていない。そこでハミルトニアン・ニューラルネットワークでは、ハミルトンの正準方程式

$$\begin{cases} \frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}} \\ \frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \end{cases}$$

Research on Accuracy and its Conservative Quantities of Hamiltonian Neural Networks

†Tetsu R. Satoh, NHN Techous Corp.

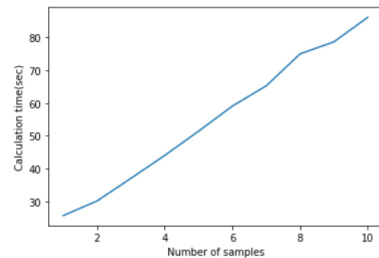


図 1: サンプル数に対する学習時間

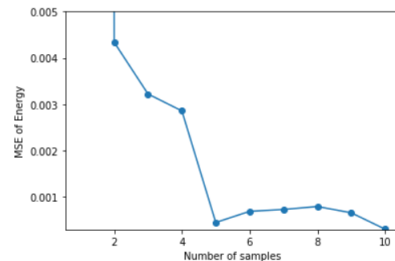


図 2: 軌道計算時のハミルトニアンの平均二乗誤差

を考える。この正準方程式を満たすような写像の条件を考えることにより、損失関数は $l = |dp/dt - \partial \hat{H} / \partial \hat{q}|^2 + |dq/dt - \partial \hat{H} / \partial \hat{p}|^2$ という要請を受ける。この要請によりハミルトニアンは $d\hat{H}/dt = \partial \hat{H} / \partial \hat{p} dp/dt + \partial \hat{H} / \partial \hat{q} dq/dt = 0$ すなわち一定であるよう計算されることが期待される。ただし、学習をどの程度精密に実施するかによりハミルトニアンが取る値の範囲は変化する。学習を精密に実施するための条件はアルゴリズムやパラメータなど多くのものがあるが、本研究では学習データの量に着目し、データの量と計算精度、計算時間について検討する。

3. データ量と計算精度に対する実験と考察

ハミルトニアン・ニューラルネットワークの計算精度と計算時間に影響を与える要因は、学習アルゴリズムや数値計算アルゴリズムなど非常に多くのものが考えられる。その中でも、学習データが少ないと写像の近似精度が落ち、また滑らかな力学系に対し多量の学習データを用いることも非効率的であるため、学習データの量は重要である。本研究では、簡単な力学系を例に取り学習データの量とハミルトニアン・ニューラルネットワークを用いた力学系の軌道計算結果について検討する。

実験では、最も簡単なハミルトニアンである一次

元調和振動子を考える：

$$H(p, q) = p^2 + q^2$$

このハミルトニアンに対し、力学系の時間方向に対するサンプル数を1から10まで変化させそれぞれのモデルを学習させた。ここでサンプル数とは、1単位時間辺り何点でハミルトニアンを評価するかを表し、サンプル数が多いほど多くの学習データを用いて精密にモデルを学習することを表す。学習時間は図1のようになり、縦軸が計算時間で単位は秒、横軸がサンプル数である。図より、概ねサンプル数の増加に対して処理時間が線形に増大していることが分かる。その後、各モデルのベクトル場を数値積分することで位相空間内の軌道を計算し、理論値からの平均自乗誤差を計算すると、図2のようになる。図より、サンプル数を増やすことで急激に誤差が減っていることが分かる。具体例として、サンプル数10、3及び1の場合の、軌道と及び時間発展に対するハミルトニアンの初期値からの差を図3、図4、図5に示す。図3はサンプル数が多い場合であり、解軌道は理論値である半径1の円となりハミルトニアンも良好に保存されている。図4はサンプル数が少ない場合で、図3の場合に比べ3分の1程度の時間で学習が終了するが、解軌道の誤差が大きく円になっていない。ハミルトニアンは発散してはいないが、図3の場合に比べ約3倍の揺れ幅がある。図5の場合は最も学習時間が短い、ハミルトニアンは発散しており軌道も閉じていない。このように、データの量により理論的な保存量がある程度保存されていても結果が不正確な場合があり、学習結果の評価だけでなく、学習したモデルを用いた計算結果の正しさを評価することが重要であると言える。

以上の実験は、Amazon Elastic Compute Cloud (Amazon EC2) の m5.xlarge 上で実施し、ハミルトニアン・ニューラルネットワークの実装は文献 [1] により言及されているコード[†]を利用した。

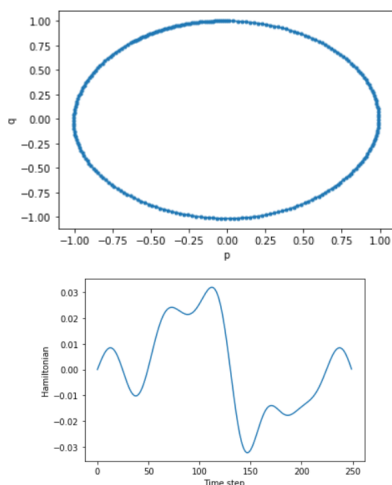


図 3: 調和振動子 (サンプル数 = 10)

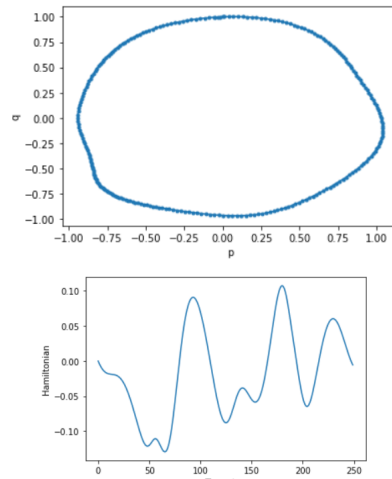


図 4: 調和振動子 (サンプル数 = 2)

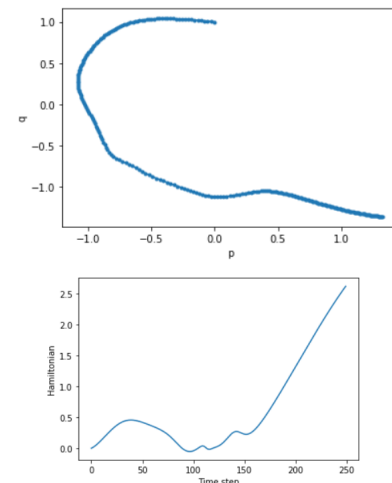


図 5: 調和振動子 (サンプル数 = 1)

4. おわりに

本研究ではハミルトニアン・ニューラルネットワークに対する学習データの量に着目し、量を変化させた場合の力学系の解軌道や保存量の計算精度について検討した。講演時は、ハミルトニアン・ニューラルネットワーク以外の提案手法 [2][3] を含めた関連研究のの構造保存型計算法 [4] における位置付けについても論じる予定である。

参考文献

- [1] S. Greydanus, M. Dzamba and J. Yosinski, Hamiltonian Neural Networks, *arXiv:1906.01563*, 2019.
- [2] S. Sæmundsson, A. Terenin, K. Hofmann and M. P. Deisenroth, Variational Integrator Networks for Physically Meaningful Embeddings, *arXiv:1910.09349*. 2019.
- [3] M. Lutter, C. Ritter and J. Peters, Deep Lagrangian Networks: Using Physics as Model Prior for Deep Learning, *arXiv:1907.04490*, 2019.
- [4] 三井斌友, 小藤俊幸, 齊藤 善弘, ハミルトン系の解法, 微分方程式による計算科学入門, 第 2 章, pp. 43–89, 2004.

[†]<https://github.com/greydanus/hamiltonian-nn>