ISSN 2186-5647

P-36

ニューラルネットワークを用いた非線形結合モデルのハミルトニアン推定

日大生産工（学部）　○牛腸 匠　日大生産工　佐々木　真

1.　背景と目的

近年では、地震や集中豪雨・感染症伝搬といった、時間空間的に局在した突発原初の予測が喫緊の課題となっている。例えば核融合発電を考えると、プラズマの非線形性[1]が引き起こす突発現象の予測・理解が必要不可欠である。これまでの研究では、フーリエ解析や、統計解析による因果律の推定等が行われてきたが、Edge localized mode (ELM)のような突発的な現象の予測はいまだ困難であり、更なる研究が必要である。

そこで本研究では近年急速に発展している機械学習に着目し、突発現象の新たな予測手法の構築を目指す。特にハミルトニアンニューラルネットワークと呼ばれる手法は、時系列データのみからその時系列発展を決めるハミルトニアンを推定することができる[2]。

上記のハミルトニアンニューラルネットワークを用いて、カオス的な複雑現象の予測を目指す。カオスシステムの予測の第一歩として、論文[2]の三体問題のデータを用いてモデルの再現を行った。このデータを、非線形振動子モデルに適用し、ハミルトニアン推定を試みている。この手法の適用によって、複雑なプラズマ乱流データにおけるハミルトニアン推定の可能性を検証し、新たな洞察や予測手法の開発を目指す。

2.　ハミルトニアン推定

ハミルトン力学は、一般化座標qと一般化運動量 pで力学系を記述するものである。ハミルトニアンによって、物理系の持つ多くの性質を記述することができる。ここで、q、pの発展は以下の正準方程式

$$\frac{\mathrm{dq(t)}}{dt}=\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{p}} \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{dp(t)}}{dt}=-\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{q}} \tag{2}$$

に従う。すなわちハミルトニアンHが得られれば運動の予測が可能となる。

論文[2]のハミルトニアンニューラルネットワークの手法では、ハミルトニアン力学の肝である正準方程式を損失関数とすることで、一般化座標qと一般化運動量pの入力からハミルトニアンをうまく表現するようなニューラルネットワークを学習している。以下に、ハミルトニアンニューラルネットワークの学習の流れについて述べる。

まず、時間方向に離散化された一般化座標qと一般化運動量pを入力データとする。また、ニューラルネットワークはパラメータ θ で特徴付けられているものとする。次に、入力層から出力層への方向を順方向として入力変数とパラメータをかけ合わせて予測値を計算し、スカラー値H_θを出力する、そして自動微分を用いて、出力層から入力層に逆伝播し、次の値を算出する。

$$\frac{\partial H_\theta}{\partial \mathrm{p}},\frac{\partial H_\theta}{\partial \mathrm{q}} \tag{3}$$

そして、教師データを生成する。一つ先の時刻の情報を使って一般化座標qと一般化運動量pの時間微分を求める。

$$\frac{dq(t)}{dt},\frac{dp(t)}{dt} \tag{4}$$

その後、正準方程式に基づいて損失関数を最小化するように学習する。

$$L_{HNN}=\left(\frac{\partial H_\theta}{\partial \mathrm{p}}-\frac{dq(t)}{dt}\right)^2+\left(\frac{\partial H_\theta}{\partial \mathrm{q}}+\frac{dp(t)}{dt}\right)^2 \tag{5}$$

損失関数が正準方程式の形であるため、モデルが学習するのは qとpが与えられたときに正準方程式を満たすようなスカラー値 H_θである。スカラー値を正準方程式にしたがって時間発展させることで次の時刻の qとpを求め、物体の時間発展を解くことができる。Fig.1にハミルトニアンニューラルネットワークの構造を示す。

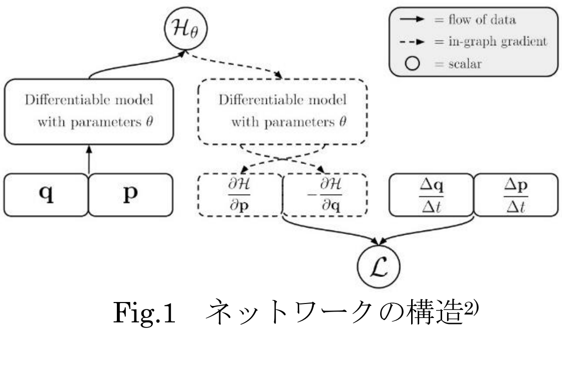

Fig.1　ネットワークの構造[2]

Prediction of Hamiltonian of Nonlinear Coupled Models Using Neural Networks

Takumi GOCHO and Makoto SASAKI

3. 三体問題

三体問題は、3つの物体（星や惑星など）がお互いに引力で相互作用する場合の運動方程式を解く問題である。論文[2] の三体問題では、ニュートンの運動方程式を用いて物体の軌道を求め、それを元にハミルトニアンニューラルネットワークとベースラインニューラルネットワークをトレーニングし、それらの性能を比較した。ここでは、三体問題のランダムな初期状態を生成し、その軌道とエネルギーを計算した。その図をFig.2に示す。そして、ランダムな初期状態から生成した軌道とエネルギー変化とトレーニングされたモデルによってモデルの性能とエネルギー保存の特性が視覚的に評価できる。その図をFig.3に示す。ベースラインモデルでは総エネルギーを保存せず、すぐにグランドトゥルースから乖離するが、ハミルトニアンモデルは全エネルギーをほぼ保存し、その軌道はグランドトゥルースに類似している。

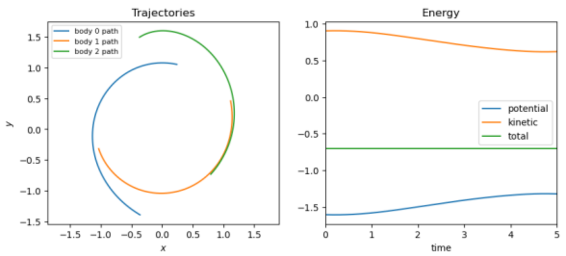

Fig.2 三体問題の軌道とエネルギー[2]

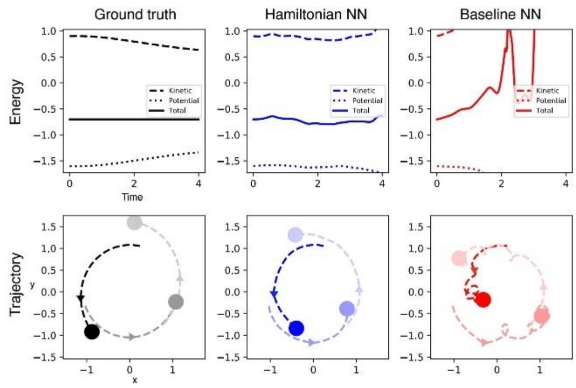

Fig.3 モデルの性能とエネルギー保存の特性[2]

4. 非線形振動子

相互作用のある3つの調和振動子を考える。各振動子の変位および運動量を$x_j, p_j (j = 0,1,2)$とし、ハミルトニアンが、

$$H = \sum_{j=0}^{2} \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{\omega_j^2 x_j^2}{2}\right) + \beta x_0 x_1 x_3 \tag{6}$$

で表されるとする[3]。ω_fは各振動子の固有振動数で、βは3つの振動子の結合定数である。よって、3つの振動子の運動方程式は

$$\frac{d^2 x_0}{dt^2} = \omega_0^2 x_0 = -\beta x_1 x_2 \tag{7}$$

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} = \omega_1^2 x_1 = -\beta x_0 x_2 \tag{8}$$

$$\frac{d^2 x_2}{dt^2} = \omega_2^2 x_2 = -\beta x_0 x_1 \tag{9}$$

と表される。

これらの式を用いて、論文[2] の三体問題のデータを非線形振動子モデルに適応する。発表では、その適応結果について紹介し、推定の統計制度等の性質について詳述する。

5. まとめ

本研究では、突発現象の新たな予測手法の構築を目指し、ハミルトニアンニューラルネットワークと呼ばれる手法を用いて、カオス的な複雑現象の予測をすることを提案した。予測の第一歩として、論文[2] の三体問題のデータを用いてモデルの再現を行った。ニュートンの運動方程式を用いて物体の軌道を求め、それを元にハミルトニアンニューラルネットワークとベースラインニューラルネットワークをトレーニングした結果、ベースラインモデルよりも、ハミルトニアンモデルはエネルギーを保存し、その軌道はグランドトゥルースに類似しているため、ハミルトニアンニューラルネットワークは三体問題のような複雑な現象についても適用可能であることを確認した。この手法を、非線形振動子モデルに適用し、ハミルトニアン推定を試みている。

学術講演会では、非線形振動子モデルに適用した結果を詳しく発表する。

参考文献

1） P. H. Diamond. et. al., PPCF 47.R35 10(2005).
2） Greydanus. Advances in neural information processing systems.32. (2019).
3） 谷内俊弥，西原功修，非線形波動，岩波書店，（1998） p.117.