

ハミルトニアンニューラルネットワークの 拡張と解析システムの構築

武蔵野大学大学院工学研究科数理工学専攻修士2年丸野恵蔵

共同研究者 高石武史(武蔵野大学) 谷口隆晴(神戸大学)

概要

ハミルトニアンニューラルネットワークは、近年広い分野で実用化が進んでいるニューラルネットワークの数値モデリングへの応用の一つである。この手法では、ハミルトニアン方程式という枠組みのみを仮定した上で、ニューラルネットワークを用いてその運動方程式を推定する方法である。今回はハミルトニアン方程式以外にこの手法を拡張するとともに、画像処理と連動させた解析システムを開発することを目指している。

ハミルトニアンニューラルネットワーク(HNN)

ハミルトニアンとは

1次元空間のハミルトンの方程式は正準変数と呼ばれる変数の組 (q,p) を用いて、

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \dots\dots (1)$$

q は座標を表していて、 p は運動量を表している。
関数 $H=H(q,p)$ はハミルトニアンと呼ばれ、力学系全体のエネルギーを表す。

この時ハミルトニアンの時間微分は、

$$\begin{aligned} H(q(t), p(t)) \Rightarrow \frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q} \frac{dq}{dt} \\ &= \frac{\partial H}{\partial p} \left(-\frac{\partial H}{\partial q} \right) + \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} = 0 \end{aligned}$$

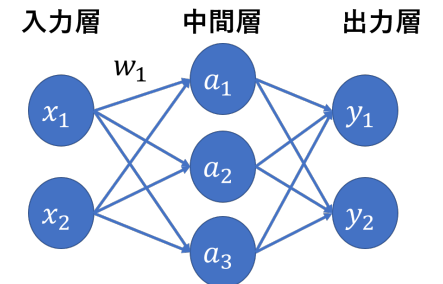
H は時間変化しない定数となることがわかる。

エネルギー保存則

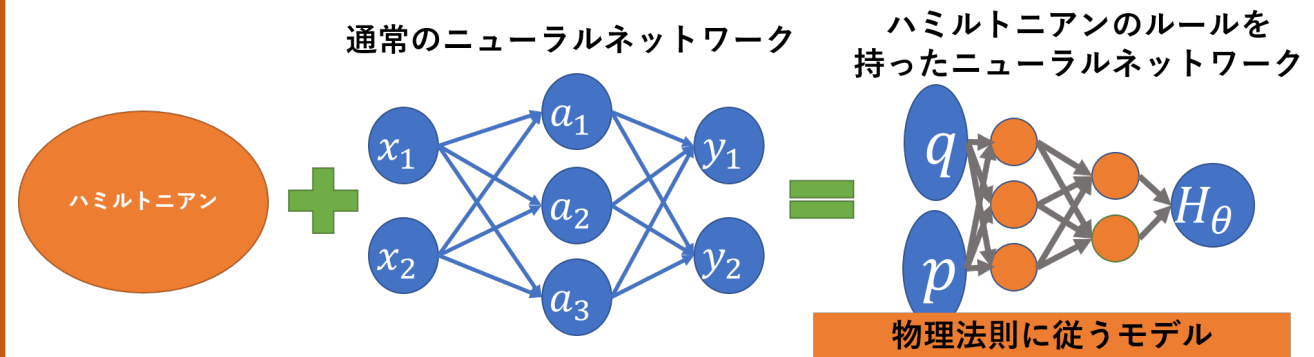
HNNとは

ニューラルネットワーク(NN)とは

人間の脳内にある神経細胞(ニューロン)とその繋がりを人工ニューロンという数式的なモデルで表現したもの。



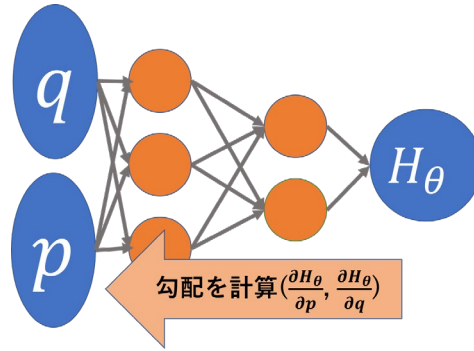
ニューラルネットワークにハミルトニアンのルールを設けてあげることで物理法則に従ったモデルを構築することが出来る



ハミルトニアンニューラルネットワーク(HNN)

HNNの手法

入力 (q, p) に対して H_θ を出力するようなNNを作り、誤差逆伝播法を用いて勾配を計算する。



$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H_\theta}{\partial p}, \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_\theta}{\partial q} \text{を満たす } H_\theta \text{ が出力するように学習}$$

ネットワークの学習が済むことで次の時間の (q^{n+1}, p^{n+1}) が求められる。

$$(q^n, p^n) \rightarrow (H_\theta)$$
$$\frac{q^{n+1} - q^n}{\Delta t} = \frac{dq}{dt} \therefore q^{n+1} = q^n + \frac{dq}{dt} \cdot \Delta t$$
$$\frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} = \frac{dp}{dt} \therefore p^{n+1} = p^n + \frac{dp}{dt} \cdot \Delta t$$

先行研究での実験結果

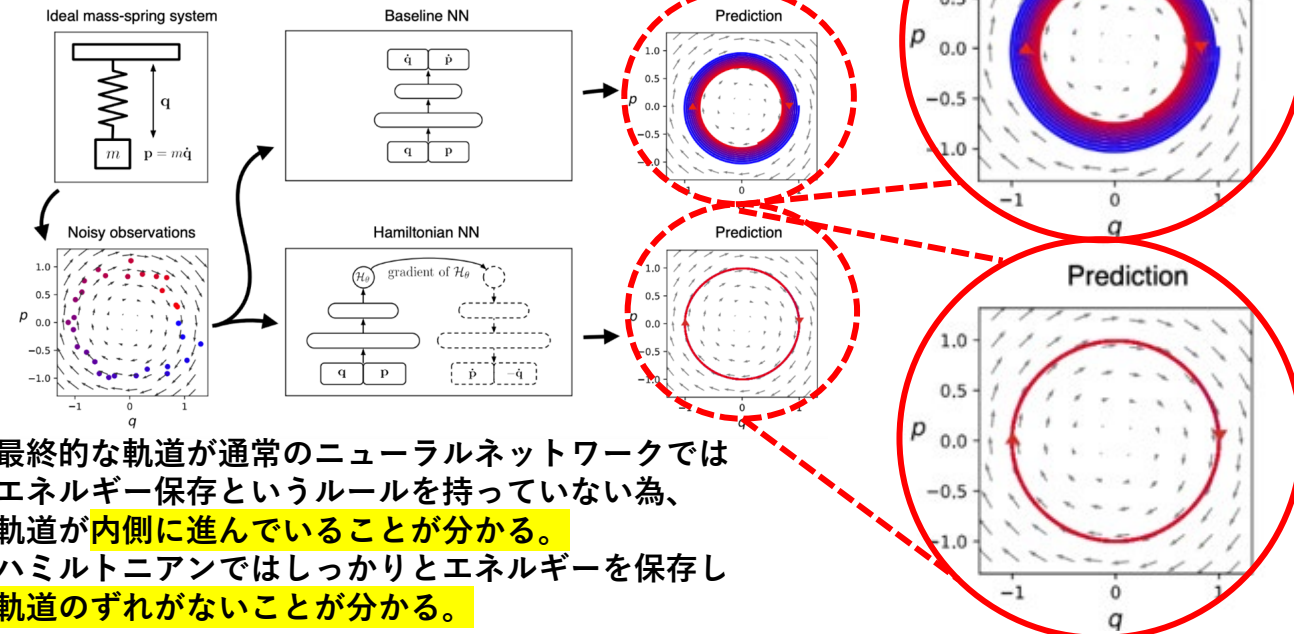
Hamiltonian Neural Networks

Sam Greydanus, Misko Dzamba, Jason Yosinski

33rd Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2019),
Vancouver, Canada.

・ 摩擦なし振り子

摩擦無し振り子のデータにノイズを加え
通常のニューラルネットワーク(上段)とハミルトニアン
ニューラルネットワーク(下段)を学習させて比較したもの。



ハミルトニアンニューラルネットワークの拡張

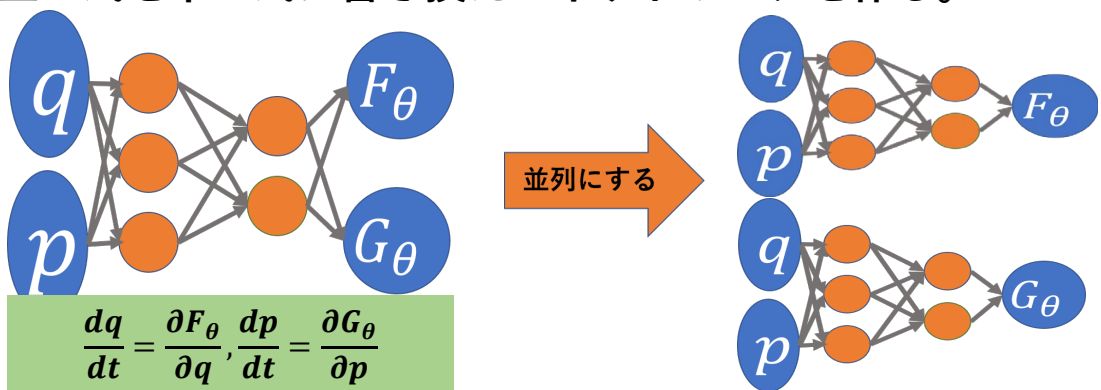
HNNの拡張

より一般的な場合を考える

$$\frac{dq}{dt} = f(q, p), \frac{dp}{dt} = g(q, p)$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial F_{\theta}}{\partial q}, \frac{dp}{dt} = \frac{\partial G_{\theta}}{\partial p}$$

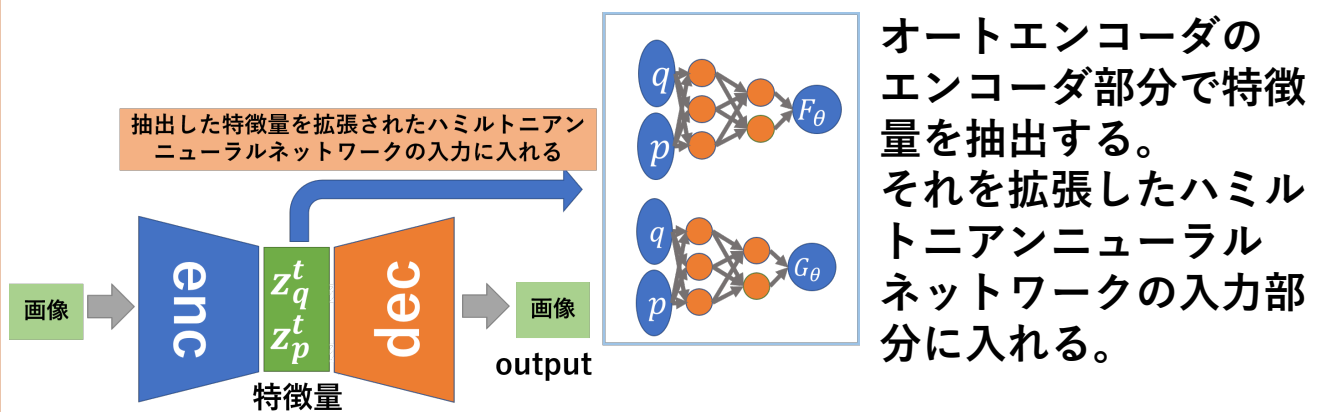
上の式を下の式に書き換えてネットワークを作る。



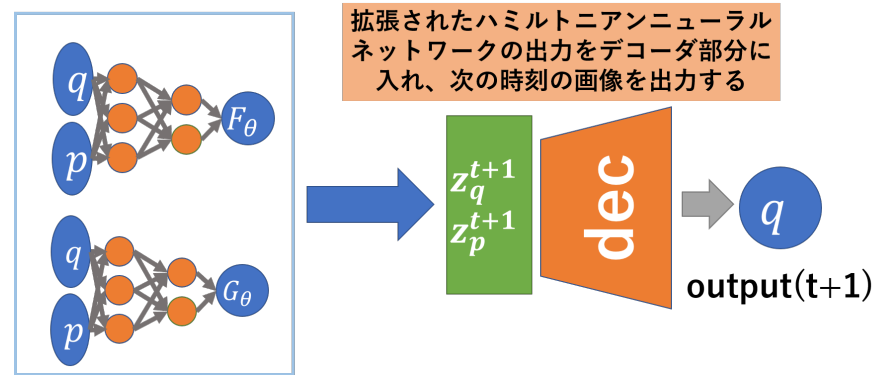
p の時間発展には G のみ、 q の時間発展には F のみが必要。
 F と G は直接関係がないと仮定し、並列にネットワークを構築する。

画像から運動を読み取り予測するシステム

画像からの予測ではオートエンコーダと組み合わせて行う



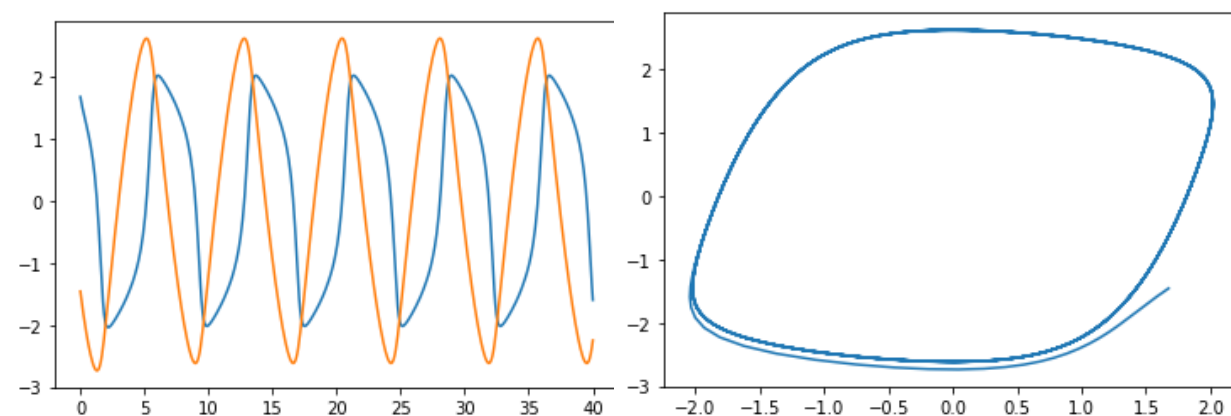
出てきた次の時刻の z_q, z_p をオートエンコーダのデコーダ部分に入力する。そうすることで次の時刻の画像を出力できる。



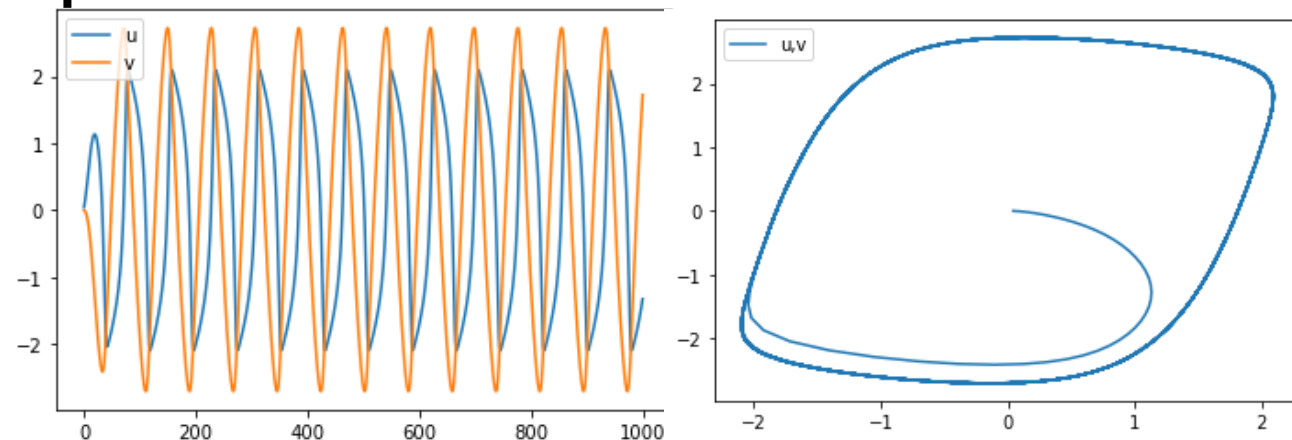
HNNの拡張を用いた実験結果

- ファンデアポール方程式に対して、HNNを拡張したものを適用した結果

入力画像から得られる図



HNNを拡張したもので次の時間を予測し
plotしたもの



HNNを拡張したニューラルネットワークで次の時間の変数をしっかりと予測できており、リミットサイクルが再現された。

今後はオートエンコーダと組み合わせることで画像からの予測に取り組みたい。