

## ВВЕДЕНИЕ В ГЛУБОКОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ НА ФИЗИЧЕСКИ ОПРЕДЕЛЕННЫХ ДАННЫХ – ГАМИЛЬТОНОВЫ / ЛАГРАНЖЕВЫ (ФИЗИЧЕСКИ ИНФОРМИРОВАННЫЕ) НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

Зрелова Дарья Петровна<sup>1</sup>, Тятюшкина Ольга Юрьевна<sup>2</sup>, Ульянов Сергей Викторович<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Аспирант;

Государственный университет «Дубна»;

Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;

Стажер-исследователь;

Объединенный институт ядерных исследований;

141980, Россия, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6;

e-mail: zrelova@jinr.ru.

<sup>2</sup>Кандидат технических наук, доцент;

Государственный университет «Дубна»;

Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;

e-mail: tyatyushkina@mail.ru.

<sup>3</sup>Доктор физико-математических наук, профессор;

Государственный университет «Дубна»;

Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;

Главный научный сотрудник;

Объединенный институт ядерных исследований;

Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6;

e-mail:ulyanovsv46\_46@mail.ru.

Глубокое машинное обучение (ГМО) достигло значительных результатов во многих задачах с большими объемами данных и обобщением в непосредственной близости от обучающих данных. Для многих важных реальных приложений эти требования невыполнимы, и для преодоления возникающих проблем и «патологических» логических парадоксов требуются дополнительные предварительные знания в предметной области. В частности, изучение физических моделей для управления на основе моделей требует надежной экстраполяции из меньшего количества выборок, которые часто собираются в режиме онлайн (в реальном времени), а ошибки модели могут привести к серьезным повреждениям системы. На наглядных примерах рассматривается эффективность метода машинного обучения (МО) с учетом физики (лагранжевых и гамильтоновых нейронных сетей) при изучении модели динамики в пространстве состояний автономного объекта управления (ОУ).

**Ключевые слова:** Глубокое машинное обучение, Лагранжевы и Гамильтоновы нейронные сети, физически осведомленные / информированные сети.

### **Для цитирования:**

Зрелова Д. П., Тятюшкина О. Ю., Ульянов С. В. Введение в глубокое машинное обучение на физически определенных данных – Гамильтоновы / Лагранжевы (физически информированные) нейронные сети // Системный анализ в науке и образовании: сетевое научное издание. 2023. № 4. С. 45-90. EDN: XWSQMW. URL : <https://sanse.ru/index.php/sanse/article/view/598>.



Статья находится в открытом доступе и распространяется в соответствии с лицензией Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (CC BY 4.0) <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru>

# INTRODUCTION TO DEEP MACHINE LEARNING BASED ON PHYSICALLY DEFINED DATA – HAMILTONIAN / LAGRANGIAN (PHYSICALLY INFORMED) NEURAL NETWORKS

Zrelova Daria P.<sup>1</sup>, Tyatyushkina Olga Yu.<sup>2</sup>, Ulyanov Sergey V.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>PhD student;  
Dubna State University,  
19 Universitetskaya Str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia;  
Research Assistant;  
Joint Institute for Nuclear Research;  
6 Joliot-Curie Str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia;  
e-mail: zrelova@jinr.ru.

<sup>2</sup>PhD in Engineering sciences, associate professor;  
Dubna State University;  
19 Universitetskaya Str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia;  
e-mail: tyatyushkina@mail.ru.

<sup>3</sup>Grand PhD in Physical and Mathematical Sciences, professor;  
Dubna State University;  
19 Universitetskaya Str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia;  
Chief Researcher;  
Joint Institute for Nuclear Research;  
6 Joliot-Curie Str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia;  
e-mail: ulyanovsv46\_46@mail.ru.

*Deep machine learning (GMO) has achieved significant results in many tasks with large amounts of data and generalization in close proximity to the training data. For many important real-world applications, these requirements are not feasible, and additional prior knowledge in the subject area is required to overcome emerging problems and "pathological" logical paradoxes. In particular, studying physical models for model-based control requires reliable extrapolation from fewer samples, which are often collected online, and model errors can lead to serious damage to the system. We consider Benchmarks as examples of the machine learning (ML) effectiveness method taking into account physics (Lagrangian and Hamiltonian neural networks) when studying the dynamics model in the state space of an autonomous control object.*

**Keywords:** Deep machine learning, Lagrangian and Hamiltonian neural networks, physically informed networks.

## **For citation:**

Zrelova D. P., Tyatyushkina O. Yu., Ulyanov S. V. Introduction to Deep Machine Learning based on physically defined data – Hamiltonian / Lagrangian (physically informed) neural networks. *System analysis in science and education*, 2023;(4):45-90 (in Russ). EDN: XWSQMW. Available from: <https://sanse.ru/index.php/sanse/article/view/598>.

## **1. Некоторые дополнительные сведения из теории глубокого машинного обучения**

Напомним, что математически МО можно условно разделить на две основные области: контролируемое (супервизорное – «с учителем») и неконтролируемое (не супервизорное – «без учителя») обучение. Алгоритмы контролируемого обучения позволяют связывать некоторые входные данные с некоторыми предоставленными маркированными выходными данными. Они нацелены на неявное или явное изучение функции  $Y = f(X)$  или вероятности  $p(Y|X)$  того, как сопоставить входной вектор данных точек данных  $X$  с некоторым соответствующим контролируемым маркированным выходом  $Y$ . С другой стороны, неконтролируемое обучение должно иметь независимый смысл и обрабатывать предоставленные данные без какого-либо контролируемого маркированного вывода, который он должен сформировать сам. В этом случае, наблюдая за случайными данными  $X$ , явно или

неявно формируют (самообучение) распределение вероятностей  $p(X)$  или некоторые характерные свойства этого распределения.

Напомним кратко основные понятия МО и основы нейронных сетей (НС) с целью погружения уравнения Эйлера-Лагранжа в глубокое обучение для получения лагранжевых нейронных сетей (ЛНС) и обобщения ЛНС на внешние неконсервативные силы, действующие на систему.

## 1.1. Методы ГМО

Мощность самой искусственной нейронной сети (ИНС) заключается в применении многоуровневой архитектуры, которая, по сути, выполняет серию встроенных математических преобразований [1,2], в некоторой степени аналогичных русским куклам, называемым «матрешками»:

$$f_p = f_n \left( \sum_q \left( w_{pq} f_{n-1} \left( \dots f_2 \left( w_{ri} f_1 \left( \sum_j (w_{ij} x_j) \right) \right) \right) \right) \right),$$

где  $y_p$  обозначает  $p$ -й выход;  $w$  представляет веса;  $j$  – количество входов/функций, а  $i$  – количество нейронов на скрытом слое;  $f_1$  обозначает функцию активации входного слоя;  $f_2$  обозначает функцию активации скрытого слоя;  $f_n$  обозначает функцию активации выходного слоя.

Многослойный перцептрон (МСП – MLP – multilayer perceptron) является наиболее фундаментальной структурой нейронной сети. МСП можно рассматривать как оценку некоторой функции  $y = f^*(x)$ , отображающую некоторый вход  $x$  в метку  $y$ . Отображение определяется как  $y = f(x, \theta)$ , где цель состоит в том, чтобы узнать параметры сети  $\Theta$ , которые лучше всего описывают аппроксимацию данных функцией:

$$y_{out} = f_{act} \left( \sum_{i=1}^n w_i x_i + b \right).$$

МСП имеют один или несколько скрытых слоев. ИНС с несколькими скрытыми слоями теперь называются «глубокими». МО происходит путем изменения весов связей между узлами соседних слоев. Огромное количество весов позволяет моделировать очень сложные функции, которые отображают входные данные (в случае классификации – признаки) в выходные данные (в классификации – метки классов). Теоретически было доказано, что МСП может сколь угодно хорошо аппроксимировать любую нелинейную функцию (Hornik et al., [1,2]). Действительно, ИНС — это высоко параметрические модели. Кроме того, многоуровневая структура позволяет выполнять обучение с использованием обратного распространения ошибки с относительно простым и надежным семейством градиентных методов в сочетании с удобно описанными функциями активации отдельных нейронов, такими как гауссовская или линейная. Однако, потенциально огромное количество весов (неизвестных параметров) требует большого количества обучающих данных, времени, вычислительных ресурсов и затрудняет объяснение поведения всей модели, поскольку связь между весами и физическим характером исходной задачи нарушена. Для сравнения, люди могут учиться на очень немногих примерах или даже на одном примере и понимать концепцию, лежащую в основе решения о классификации, а также объяснять и формулировать ее другим. Системы искусственного интеллекта будущего типа объяснительного интеллекта (ХАИ) должны будут эмулировать такие возможности.

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 модели ОУ в пространстве состояний?

**Примечание.** Модели в решении задачи идентификации структуры ОУ часто представляют либо моделями «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, задача исследуемого направления состоит в том, чтобы формировать модель «серого ящика», которая будет изучать модель в пространстве состояний. Здесь модель серого ящика означает модель, которая обучается на данных, руководствуясь при этом некоторыми физическими свойствами или законами. Такие модели можно в дальнейшем применять эффективно для адаптивного управления.

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 network), изучает эти инвариантные величины непосредственно из (пиксельных) данных. Дополнительный класс моделей под названием лагранжевы нейронные сети (ЛНС) 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. Воспроизведение данных из законов — это физика; вывод законов из данных — это обучение с учетом физики [3, 4]. 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 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 (см. рис. 1) также вводит предположения о сохранении или диссипации энергии на входных данных и имеет дополнительные вычислительные затраты.

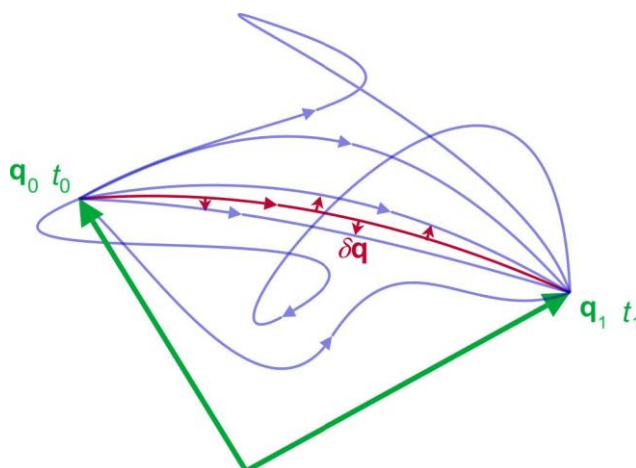


Рис.1. Пример Гамильтоновой динамики

Целью 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 МО «с учителем», чтобы исследовать его потенциал в понимании динамики ОУ с позиции объяснительного ИИ (ХАИ).

Напомним кратко понятия МО и основы НС с целью объяснить ниже, как уравнение Эйлера-Лагранжа включается в глубокое обучение (*DL – deep learning*) для получения ЛНС и как обобщить ЛНС на внешние неконсервативные силы, действующие на систему.

МПС имеют один или несколько скрытых слоев. ИНС с несколькими скрытыми слоями теперь называются «глубокими». МО происходит путем изменения весов связей между узлами соседних слоев. Огромное количество весов позволяет моделировать очень сложные функции, которые отображают входные данные (в случае классификации – признаки) в выходные данные (в классификации – метки классов). Как отмечалось, теоретически было доказано, что МСП может сколь угодно хорошо аппроксимировать любую нелинейную функцию; ИНС – это высокопараметрические модели. Кроме того, многоуровневая структура позволяет выполнять обучение с использованием обратного распространения ошибки с относительно простым и надежным семейством градиентных методов в сочетании с удобно описанными функциями активации отдельных нейронов, такими как гауссовская или линейная.

Однако, потенциально огромное количество весов (неизвестных параметров) требует большого количества обучающих данных, времени, вычислительных ресурсов и затрудняет объяснение всей модели, поскольку связь между весами и физическим характером исходной задачи нарушена. Для сравнения, люди могут учиться на очень немногих примерах или даже на одном примере и понимать концепцию, лежащую в основе решения о классификации, а также объяснять и формулировать ее другим. Системы искусственного интеллекта будущего типа объяснительного интеллекта (ХАИ) должны будут эмулировать такие возможности.

При изучении лагранжиана системы, полученной из уравнения Эйлера-Лагранжа, методы исследования имеют некоторые отличия, имея либо более общий характер и фокусируется на физических задачах путем изучения произвольных лагранжианов, или, например, ориентируются на робототехнику и твердые тела. 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 условием. 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 данных.

МСП в основном состоит из искусственных нейронов, которые пытаются имитировать, как нейроны в мозгу активируются на основе полученного ввода. Персептрон (также известный как искусственный нейрон) показан на рис. 2(а), где определенное количество входных данных взвешивается, суммируется вместе с членом смещения, а затем преобразуется в скаляр с помощью нелинейной функции активации  $f_{act}(\cdot)$ .

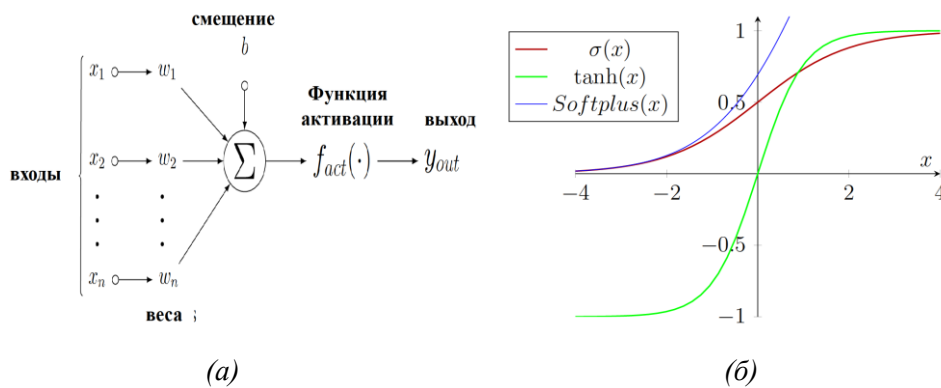


Рис. 2. (а) Персептрон, демонстрирующий функциональность одного нейрона [Выходные данные  $y_{out}$  активируются на основе взвешенных входных данных, которые суммируются вместе с членом смещения  $b$ , прежде чем они будут преобразованы с помощью факта нелинейной функции активации  $f_{act}(\cdot)$ .]; (б) Некоторые общие нелинейные функции активации для нейронов  $f_{act}(\cdot)$

Типовые структуры функций активации приведены на рис. 2(б).

Для прямой реализации обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), которые описывают физику проблемы как ГНС, используют модели ориентированного графа. Поэтому оптимизация гипер-параметров осуществляется посредством обратного распространения ошибки аппроксимации.

В исследованиях варьируют количество слоев и нейронов в каждом слое, а также функции активации. Обычно используемые функции активации включают логистическую сигмоиду  $1/(1+e^{-x})$  и спрямленную линейную единицу (ReLU,  $\max\{x, 0\}$ ); линейная, гиперболическая касательная ( $\tanh$ ) и экспоненциально-линейная единичная (elu) функции активации представлены следующим образом:

$$\ln(x) = x, \quad \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad \text{и} \quad \text{elu}(x) = \begin{cases} x, & \text{при } x > 0 \\ e^x - 1 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Для прямой реализации ОДУ, которые описывают физику проблемы как ГНС, используют модели ориентированного графа. Поэтому оптимизация гиперпараметров осуществляется посредством обратного распространения ошибки аппроксимации.

Как показано на рис. 3, каждая итерация алгоритма оптимизации состоит из двух шагов.

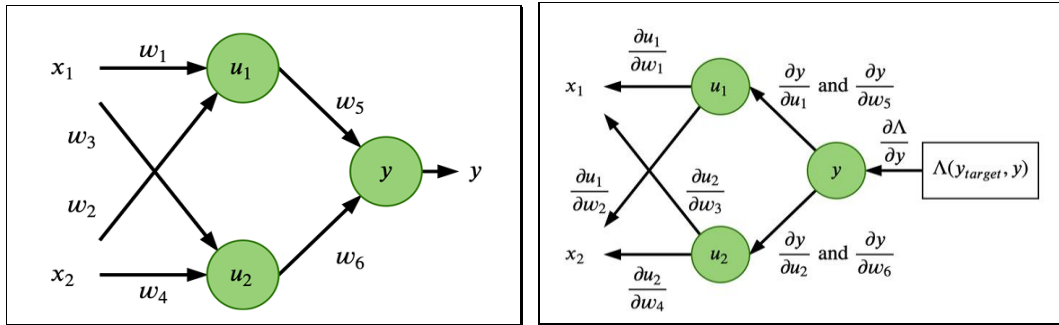


Рис. 3. Способы обратного распространения (а) Прогноз (прямое распространение); (б) обучение (обратное распространение)

При прогнозировании входные данные передаются вперед (слева направо), генерируя активацию скрытых слоев  $u_i$  и выходного слоя  $y$ . При обучении частные производные передаются в обратном направлении, создавая градиент функции потерь по отношению к весам,  $\nabla \Lambda = \left[ \frac{\partial \Lambda}{\partial w_1} \dots \frac{\partial \Lambda}{\partial w_6} \right]^T$ .

Типовая задача обучения состоит в том, чтобы найти модель, способную точно предсказать новые экспериментальные измерения с учетом полученных данных.

Одним из эффективных способов сделать это с помощью МО является использование именно НС. Учитывая местоположение точки данных в качестве входных данных (обозначим как  $x$ ), НС можно использовать для вывода прогноза ее значения (обозначенного  $u$ ), как показано на рис. 4.

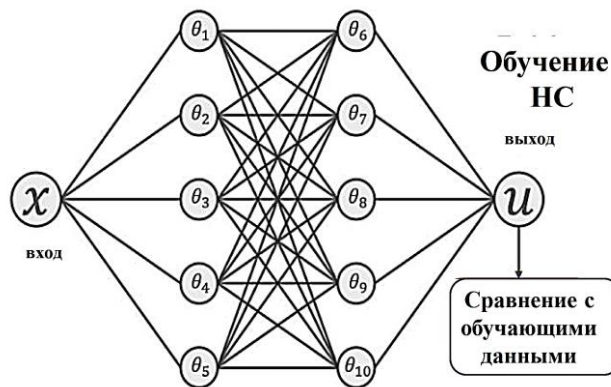


Рис. 4. Схема нейронной сети без учета знаний о законе физики, заложенных в массив экспериментальных данных об исследуемом процессе

Для обучения и формирования модели по входным данным  $x$ , необходимо настроить свободные параметры сети (обозначенные буквой  $\theta_s$  на рис. 4), чтобы прогнозы сети точно соответствовали доступным экспериментальным данным. Обычно это делается путем минимизации среднеквадратичной ошибки между прогнозами НС и точками обучающей траектории в виде

$$\min \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_{NN}(x_i, \theta) - u_{\text{true}}(x_i))^2.$$

Учитывая ограничения «наивных» подходов к МО, таких как аппроксимация траектории движения физической системы траекторией к ней близкой по критерию минимуму среднеквадратичной ошибки, исследуют способы включить этот тип предшествующих научных знаний в процессы МО в процветающей области «научного машинного обучения».

Один из способов использовать НС, основанную на физике исследуемой системы [1,2]. Идея очень проста: добавить известные дифференциальные уравнения прямо в функцию потерь при обучении НС. Это делается путем выборки набора входных обучающих значений начальных функций и передачи их по НС. Следующие градиенты выхода сети по отношению к ее входу вычисляются в этих местах (которые обычно доступны аналитически для большинства НС и могут быть легко вычислены с помощью автодифференцирования). Наконец, остаток базового дифференциального уравнения вычисляется с использованием этих градиентов и добавляется в качестве дополнительного члена в функцию потерь.

Одним из эффективных способов сделать это с помощью МО является использование именно НС. Учитывая местоположение точки данных в качестве входных данных (обозначим как  $x$ ), НС можно использовать для вывода прогноза ее значения (обозначенного  $u$ ), как показано на рис. 5.

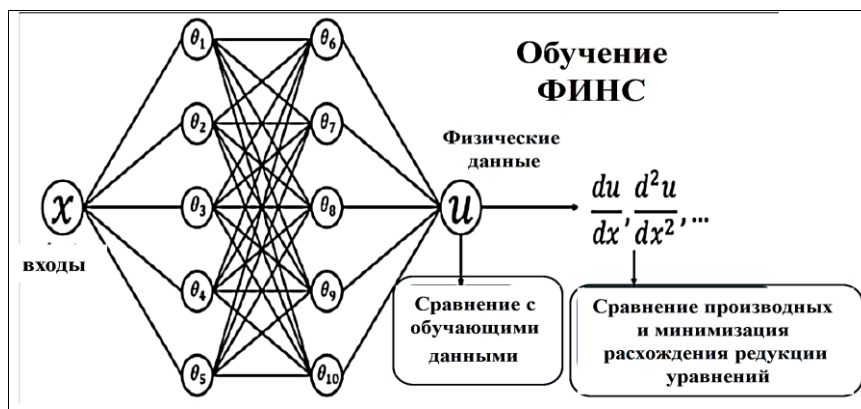


Рис. 5. Схема нейронной сети, основанной на физическом описании модели

**Примечание.** В решениях на основе ГМО распространены три основные стратегии обучения: обучение с учителем, обучение без учителя и обучение с подкреплением. Предлагаемые методы используют все эти различные стратегии обучения. Для ясности они кратко представлены следующим образом. Обучение с учителем направлено на вывод функции, которая объясняет связь между входными и целевыми функциями (т. е. метками) с учетом помеченного набора обучающих данных. Неконтролируемое обучение направлено на вывод функции для описания скрытой структуры из немаркированного набора обучающих данных. Наконец, обучение с подкреплением предполагает политику, которая максимизирует желаемую производительность (вознаграждение) с учетом определенного контекста (среды).

Конкретно, чаще рассматриваются четыре основные дискриминационные НС, т. е. алгоритмы, которые изучают прямое отображение из пространства входов ( $x$ ) в метку ( $y$ ): НС с прямой связью, рекуррентные НС, сверточные НС и автоэнкодеры.

**А. Нейронная сеть с прямой связью (НС-ПС).** ГНС с прямой связью с  $L$  слоями представляет собой ориентированный ациклический граф, реализующий отображение  $\mathcal{G}: R^n \mapsto R^{m^L}$  со следующей структурой:

$$\mathcal{G}: \mathcal{G}^L \circ \mathcal{G}^{L-1} \circ \dots \circ \mathcal{G}^1, \quad \mathcal{G}^l = \sigma^l \circ \bar{\mathcal{G}}^l, \quad \bar{\mathcal{G}}^l(x) = w^l x + b^l \in R^{m^l}.$$

Следовательно, НС-ПС представляет собой семейство функций  $\mathcal{G}_{\mathcal{H}_{\mathcal{G}}}$ , параметризованных параметрами  $\mathcal{H}_{\mathcal{G}} = \{w^l, b^l\}_{l=1}^L$  (т. е. матрицами весов  $w^l$  и смещениями  $b^l$  для каждого слоя).  $\sigma^l$  обозначает нелинейные функции активации (например,  $\tanh$ ,  $\text{ReLU}$  и т. д., см. Рис.2), а  $\bar{\mathcal{G}}^l$  обозначает линейный предварительный активации. Число нейронов в каждом слое  $m^l$  задается. Наиболее подходящая функция ( $\mathcal{G}_{\mathcal{H}_{\mathcal{G}}}$ ) получается с помощью алгоритма обратного распространения при заданном обучающем наборе  $S_T = \{x^{(i)}, y^{(i)}\}_{i=1}^m$  из  $m$  пар «вход-выход».

Эмпирический риск на обучающем наборе  $S_T$  обычно выбирается в качестве метрики оптимизации для создания дискриминационных моделей.

Минимизатор эмпирического риска определяется как:

$$\mathcal{G}_{\hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{G}}}(S_T) = \operatorname{argmin}_{\mathcal{H}_{\mathcal{G}}} J(\mathcal{G}_{\mathcal{H}_{\mathcal{G}}}(x); S_T),$$

где  $\hat{\mathcal{H}}$  соответствует оптимальным весам и смещениям НС  $\mathcal{G}$ , а  $J(\mathcal{G}, S_T)$  обозначает риск обучения  $\mathcal{G}$  на обучающей выборке  $S_T$ ,  $J(\mathcal{G}, S_T) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ell(y^{(i)}, \mathcal{G}(x^{(i)}))$  и

$$\ell(y, \mathcal{G}(x)) = \begin{cases} \frac{1}{2} \|y - \mathcal{G}(x)\|_2^2 & \text{регрессия} \\ 1 - \delta_{y, \mathcal{G}(x)} & \text{классификация,} \end{cases}$$

где  $\delta_{y, \mathcal{G}(x)}$  – дельта-функция Кронекера, т.е.  $\delta_{y, \mathcal{G}(x)} = \begin{cases} 1 & y = \mathcal{G}(x) \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$

**Б. Рекуррентная нейронная сеть.** Рекуррентные нейронные сети (Р-НС) представляют собой семейство НС, специализированных для обработки последовательности значений  $x^{(1)}, \dots, x^{(m)}$ . Таким образом, модели Р-НС могут устанавливать временные зависимости во входных выборках. Его базовую форму, т. е. рекуррентную ячейку, можно рассматривать как обобщенную нелинейную динамическую систему со следующей базовой структурой:

$$s^{(t)} = G(s^{(t-1)}, x^{(t)}; \mathbf{H}_{\mathcal{G}}), \quad G = \sigma \circ \bar{G}, \quad \bar{G}(s^{(t-1)}, x^{(t)}; \mathbf{H}_{\mathcal{G}}) = w s^{(t-1)} + U x^{(t)} + b,$$

где  $s^{(t)}$  обозначает состояние ячейки в момент времени  $t$ , а  $\mathcal{H}_{\mathcal{G}} = (U, w, b)$  – гипер-параметры ячейки. Состояние ячейки изменяется с течением времени как нелинейная функция предыдущего состояния и текущего входного образца. Следовательно, проявляются марковские свойства и свойства инвариантности во времени. Глубокий аналог, однако, имеет иерархическое скрытое состояние, в котором состояние ячейки в момент времени  $t$  на уровне  $l$  (т.е.  $s^{(t),l}$ ) развивается не только как нелинейная функция предыдущего состояния в момент времени  $t-1$  (т.е.  $s^{(t-1),l}$ ), но и как состояние в момент времени  $t$  на предыдущем уровне (т. е.  $s^{(t),l-1}$ ). Результирующая структура модели имеет тогда следующий вид:

$$s^{(t),l} = G^l(s^{(t-1),l}, x^{(t)}; \mathbf{H}_{\mathcal{G}}), \quad s^{(t),l} = G^l(s^{(t-1),l}, x^{(t),l-1}; \mathbf{H}_{\mathcal{G}}) \quad l = 1, \dots, L,$$

и выход рекуррентной сети связан с состоянием ячейки последнего скрытого слоя в виде

$$G = \sigma^L \circ \bar{G}, \quad \bar{G}(s^{(t),L}; \mathbf{H}_{\mathcal{G}}) = V s^{(t),L} + c.$$

Результирующее семейство функций  $\mathcal{G}_{\mathcal{H}_{\mathcal{G}}}$  параметризуется весовыми матрицами и смещениями для каждого слоя, т.е. параметрами  $\mathcal{H}_{\mathcal{G}} = \{U^l, w^l, b^l, V, c\}_{l=1}^L$ , которые получаются с помощью алгоритма обратного распространения ошибки во времени. Тем не менее, Р-НС, обученные с помощью данного алгоритма, зависят от поведения градиентов. Было показано, что клетки с долговременной-кратковременной памятью (КД-КП) минимизируют эти проблемы за счет включения внутреннего цикла, который дает возможность удалять или добавлять информацию в  $s^t$  (т.е., клетка КД-КП способна обучаться «забывать»). Базовой структурой архитектуры КД-КП является модуль КД-КП. Этот блок состоит из ячейки памяти, как в ячейке Р-НС, и трех дополнительных вентилях, а именно входных ( $i$ ), забывающих ( $f$ ) и выходных ( $o$ ). Формально это описывается следующим образом:

$$i^{(t)} = \sigma(w_i [s^{(t-1)}, x^{(t)}] + b_i), \quad f^{(t)} = \sigma(w_f [s^{(t-1)}, x^{(t)}] + b_f), \quad o^{(t)} = \sigma(w_o [s^{(t-1)}, x^{(t)}] + b_o) \\ \tilde{C}^{(t)} = \tanh(w_c [s^{(t-1)}, x^{(t)}] + b_c), \quad C^{(t)} = f^{(t)} \cdot C^{(t-1)} + i^{(t)} \cdot \tilde{C}^{(t)}, \quad s^{(t)} = o^{(t)} \cdot \tanh(C^t),$$

где  $(\cdot)$  обозначает поэлементное умножение.



Для моделей Р-НС потери определяются последовательностью  $x^{(1)}, \dots, x^{(m_h)}$  при заданной выходной последовательности  $y^{(1)}, \dots, y^{(m_h)}$  и соответствующем эмпирическом риске

$$J(y^{(1)}, \dots, y^{(m_h)}) = \sum_{t=1}^{m_h} J(G(s^{(t)}; H_G)).$$

**В. Сверточные нейронные сети.** Сверточные нейронные сети (С-НС) представляют собой специализированную НС для обработки данных с топологией, напоминающей сетку, и включают данные временных рядов (т. е. одномерную сетку с выборками, сделанными через равные промежутки времени) и данные изображения (т. е. двумерную сетку пикселей). Глубокие С-НС добились значительных успехов в приложениях компьютерного зрения, обработки естественного языка и распознавания речи. Основной характеристикой глубоких С-НС является их способность изучать иерархии инвариантных к сдвигу функций с помощью операций свертки с накоплением. Для временных рядов от одного датчика, дискретизированных через равные промежутки времени, операцию свертки можно записать в виде бесконечной суммы  $s^{(t)} = \sum_{a=-\infty}^{\infty} x^{(a)} w_c^{(t-a)}$ , где  $x$  – измерения входного временного ряда,  $a$  – целое число, представляющее степень измерения, а  $w_c$  – весовая функция, также называемая «ядром» или «фильтром».

Для сверток во времени многомерных временных рядов, например, одномерных слоев свертки, входные данные  $x$  часто подготавливаются в двумерном формате, где одно измерение представляет собой каждый из входных признаков, например, измерения датчиков и другой – временная последовательность каждой функции. Весовая функция  $w(a)$  заменяется дискретным фильтром  $w_c \in R^{h \times n}$  длины  $h$ . Операция свертки над  $h$  последовательными входными векторами, начиная с  $t$ -го (т. е.  $X^{(t:t+h+1)}$ ) выводит скалярную функцию  $s^{(t)} = \sigma(w_c \cdot X^{(t:t+h+1)} + b_c)$ , где  $X^{(t:t+h+1)} \in R^{h \times n}$  – матрица,  $i$ -я строка которой равна  $x_i \in R^n$ , а  $b_c \in R$  – смещение. Символ  $\cdot$  обозначает скалярное произведение. Операции свертки обычно выполняются с  $kl$  фильтрами или ядрами на слой, и результирующее пространство признаков  $s^{(t)} \in R^{kl}$ , где каждое измерение исходит из отдельного фильтра.

**Г. Автоэнкодер.** Автоэнкодер — это любая НС, целью которой является изучение карты идентичности (т. е. она обучена восстанавливать собственные входные данные). Следовательно, это частный случай предыдущих сетей, состоящих из двух частей с симметричной топологией: кодера ( $E$ ) и декодера ( $D$ ). Кодер ( $E$ ) обеспечивает альтернативное представление ввода ( $x$ ), которое обозначается как  $z$  и называется внедрением или скрытым представлением. Декодер ( $D$ ) восстанавливает ввод (т. е.  $\bar{x}$ ) как можно точнее из его закодированного представления  $z$ . Полученное отображение соответствует следующей структуре:

$$G = D \circ E, \quad E = G^L \circ \dots \circ G^1 : R^n \rightarrow R^d, \quad x \rightarrow z : x^l, \quad D = G^L \circ \dots \circ G^{L+1} : R^d \rightarrow R^n, \quad z \rightarrow \bar{x},$$

где слой  $l_z$  обычно является «узким» местом (т. е.  $d < n$ ), и поэтому  $z$  является сжатым представлением входных данных. Автоэнкодеры — это мощные нелинейные обобщения анализа главных компонент. Функция потерь автоэнкодеров имеет вид

$$\ell(x, \bar{x}) = \frac{1}{2} \|x - G(x)\|_2^2.$$

В дополнение к архитектурам НС, описанным в этом разделе, используются дополнительные архитектуры НС, например, вариационные автоэнкодеры (VAE) (и иерархические машины экстремального обучения).

**Д. Иерархические машины экстремального обучения.** Иерархические машины экстремального обучения (ИМ-ЭО) еще один популярный класс НС для прикладных задач. Сети ИМ-ЭО имеют сходство с тремя методами, описанными ранее, но с другой топологией и методом обучения. Как и в глубоких сетях Р-НС и П-НС, ИМ-ЭО из  $L$  слоев имеет уровни представления иерархии на каждом уровне (т.е.  $s^l$ ). Данное иерархическое скрытое состояние  $s^l$ , которое развивается как функция предыдущего состояния  $s^{l-1}$ , определяет направленный ациклический граф. Однако, в этом случае оно развивается как линейное преобразование

$$s^l = G^l(s^{l-1}, \beta^l) \in R^{m^l}, \quad G^l(s^{l-1}, \beta^l) = s^{l-1} \beta^{lT} \quad l = 1, \dots, L-1, \quad s^0 \triangleq x$$

Выход сети ИМ-ЭО связан с состоянием последнего скрытого слоя  $s^{L-1}$  следующим образом:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}^L \beta^L, \quad \mathcal{G}^L = \sigma^L \circ \bar{\mathcal{G}}^L, \quad \bar{\mathcal{G}}^L = w^L s^{L-1} + b^L, \quad s^{L-1} = G^{L-1} \circ \dots \circ G^1(x).$$

В отличие от предыдущих сетей параметры  $\mathcal{H}_{\mathcal{G}} = \{w^l, b^l\}_{l=1}^L$  (т. е. весовые матрицы  $w^l$  и смещения  $b^l$  для каждого слоя) являются случайными и не оптимизируются. Следовательно, они обеспечивают альтернативное (случайное) представление состояния  $s^{L-1}$  (т. е.  $G^L$ ) с заданными весами  $\{w^l, b^l\}$  и нелинейным преобразованием  $\sigma^l$ . Весовая матрица  $\beta^l$  оптимизируется послойно для восстановления состояния  $s^{L-1}$  из этой случайной проекции. Следовательно, функция потерь  $\beta$  является аналогом функции потерь автоэнкодера. Однако типовые схемы регуляризации должны соответствовать апостериорному максимуму

$$\beta^l = \arg \min_{\beta^l} \lambda \left\| \beta^l \right\|_1 + \left\| \mathcal{G}^l \beta^l - s^{l-1} \right\|_2^2, \quad \mathcal{G}^l = \sigma^l \circ \bar{\mathcal{G}}^l, \quad \bar{\mathcal{G}}^l = w^l s^{l-1} + b^l, \quad s^l \triangleq y$$

ИМ-ЭО обычно называют сетью автоэнкодера из-за процесса обучения сети, где весовая матрица  $\beta$  получается в результате решения сети автоэнкодера для каждого из скрытых слоев ИМЭО.

Метод «Deep RL» использовался для системной идентификации и управления БПЛА (AUV). В RL самообучающиеся агенты итеративно принимают решения, основанные на максимизации будущих поощрений в отношении своих действий и окружающей среды. Deep RL использует ГНС для принятия таких решений. Поскольку одной из основных целей RL является решение сложных задач на основе необработанных многомерных сенсорных данных, они применялись в различных областях.

Глубокое RL можно далее разделить на безмодельное и основанное на моделях. Благодаря некоторым прорывам в методах безмодельного RL, таких как алгоритм «Deep Q Network» (DQN), показана способность учиться играть в игры Atari на сверхчеловеческом уровне, используя только необработанные пиксели в качестве входных данных. Это стало возможным благодаря использованию НС для самостоятельной оценки функции действия-ценности системы. Несмотря на подобные успехи, DQN учатся, наблюдая за многомерными пространствами наблюдения, но страдают от ограничения, заключающегося в том, что они могут работать только в дискретных и низкоразмерных пространствах действия. Такие системы, как AUV, имеют большие степени свободы и, следовательно, могут часто требовать многомерного пространства действий в своих представлениях в пространстве состояний. Таким образом, были внесены улучшения в новые методы, чтобы применить Deep RL для управления AUV (см., Приложение ЛП03).

НС, основанная на физике исследуемого процесса, способна предсказывать решение с учетом точек экспериментальных данных и, таким образом, работает намного лучше, чем «наивная» ИНС. Можно утверждать, что эта сеть действительно имеет некоторое предварительное знание о принятых предыдущих физических принципах.

**Пример.** Предположим, что известно физическое (динамическое) поведение ОУ и подчиняется закону Ньютона в виде следующего дифференциального уравнения:

$$m \frac{d^2 u}{dx^2} + \mu \frac{du}{dx} + ku = 0,$$

где  $m$  – масса осциллятора,  $\mu$  – коэффициент трения,  $k$  – постоянная пружины. Это равносильно использованию следующей функции потерь для обучения НС на рис.5:

$$\min \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_{NN}(x_i, \theta) - u_{true}(x_i))^2 + \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left( \left[ m \frac{d^2}{dx^2} + \mu \frac{d}{dx} + k \right] u_{NN}(x_j, \theta) \right)^2.$$

Таким образом, введение дополнительной «физической потери» в предыдущую функцию потерь дает возможность гарантировать, что решение, полученное сетью, согласуется с известным законом физики.

Во-первых, обучающие данные передаются вперед, генерируя соответствующие выходные данные (рис. 3(а)), ошибку предсказания и, наконец, функцию потерь. Затем сопряженная функция

потерь распространяется назад (по правилу цепи), задавая градиент по отношению к параметрам, которые необходимо оптимизировать. Рисунок 3(б) представляет собой графическое представление обратного прохода для МСП. Несмотря на то, что на рис. 3 показаны только весовые гиперпараметры ( $w$ ), формулировка может быть расширена для случая, когда каждый персептрон также имеет член смещения ( $b$ ). Формально из рис. 3(б) градиент функции потерь по весам можно записать как

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial w_1} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u_1} \frac{\partial u_1}{\partial w_1}, \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial w_2} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u_1} \frac{\partial u_1}{\partial w_2}, \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial w_3} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u_2} \frac{\partial u_2}{\partial w_3},$$

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial w_4} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u_2} \frac{\partial u_2}{\partial w_4}, \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial w_5} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial w_5}, \quad \text{и} \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial w_6} = \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u_2} \frac{\partial u_2}{\partial w_6}.$$

Рисунок 3 также дает представление о двух важных аспектах рассматриваемой структуры. Во-первых, распространение вперед должно быть реализовано с помощью доступных тензорных операций. Во-вторых, при обратном распространении важно иметь взаимно доступные сопряжения. Имея этот инструментарий, можно начать реализовывать обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) в ГНС.

По сути, НС представляет собой соединение нескольких искусственных нейронов, соединенных слоями. Слои сети можно разделить на входной слой, скрытые слои и выходные слои (см. рис. 6).

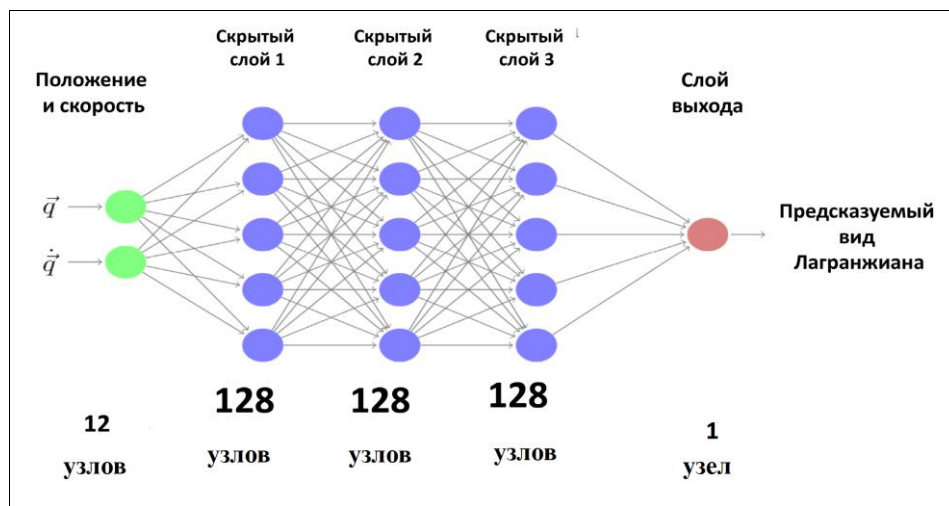


Рис. 6. Иллюстрация лагранжевой нейронной сети

Входными данными сети являются положение и угловая ориентация с соответствующими производными по времени. Результатом является лагранжиан системы, который используется для получения ускорения. Каждый из отдельных узлов имеет свои индивидуальные веса и условия смещения в соответствии с МСП на рис. 3.

Представим краткий обзор ГНС и автоматического дифференцирования, а также представляем алгоритм и теорию физически информированных НС (ФИНС) для решения уравнений в частных производных (УЧП). Затем мы проводим сравнение между ФИНС и МКЭ и обсудим, как использовать ФИНС для решения УЧП и обратных задач.

## 2. Модели физически информированных / осведомленных классических лагранжевых / гамильтоновых нейронных сетей в глубоком обучении

Отметим ключевые моменты:

- МО 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 бесвязные реализации.

- НС, основанные на физике, 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 многообещающими областями будущих исследований.
- Существует потребность в разработке новых структур и стандартизированных контрольных показателей, а также новой математики для масштабируемых, надежных и точных обучающих машин следующего поколения, основанных на физике.

Основная цель – сделать алгоритм обучения основанным на физике равнозначно введению соответствующих наблюдаемых, индуктивных или обучающих изменений, которые могут направить процесс обучения в направлении поиска физически согласованных решений (см. рис. 7).

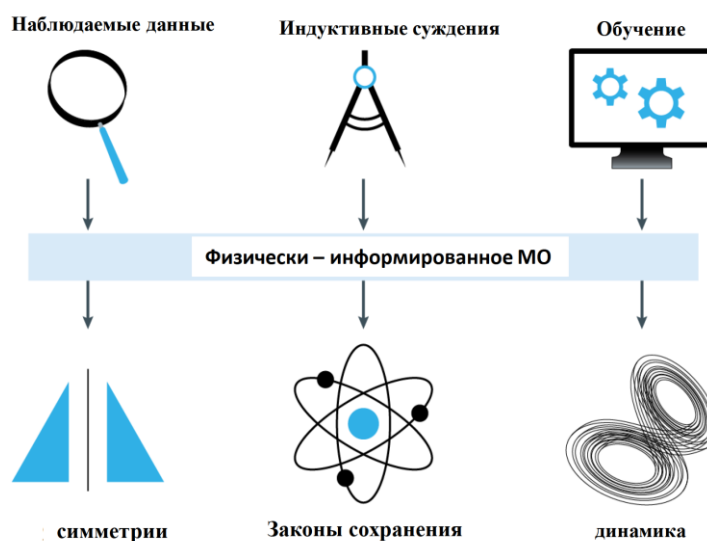


Рис. 7. Принципы обучения физике на основе информации [3, 4]

Принципы обучения физике на основе информации:

- Погрешности наблюдений могут быть введены непосредственно через данные, которые воплощают лежащую в основе физику, или тщательно разработанные процедуры дополнения данных. Обучение системы МО 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 МО с помощью специализированных вмешательств, так что искомые прогнозы гарантированно неявно удовлетворяют набору заданных физических законов, обычно выражаемых в виде определенных математических ограничений. 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 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 МО, чтобы явно способствовать сходимости к решениям, которые соответствуют базовой физике. 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 даже 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 (см. рис. 8).

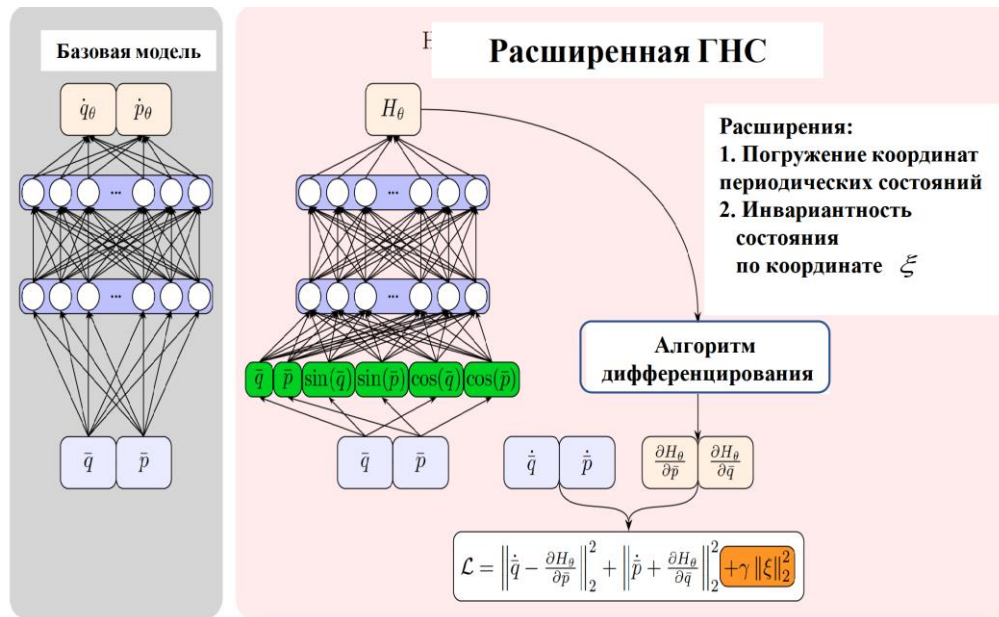


Рис. 8. Используемые архитектуры нейронной сети [5,6]

[Серый прямоугольник: базовая сеть, красный прямоугольник: HNN с двумя расширениями. Зеленым цветом показано расширение *Embedded Coordinates* (EC) для работы с периодичностью (расширяет входные данные сети новым слоем с тригонометрическими функциями входных данных), а оранжевым цветом показано расширение *Invariances* (I) для обеспечения инвариантности (расширяет функцию потерь с помощью штрафной срок для обеспечения неизменности в заданной форме)]

Большинство динамических моделей реальных ОУ не включают 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 обучения. Поэтому стремятся к разработке подхода, основанного на данных, который включает в себя законы физики, чтобы изучить модель объекта управления в пространстве состояний. Точнее, изучение структуры ЛНС (LNN) для многомерных систем. Кроме того, расширяется функциональная структура ЛНС для учета неконсервативных сил, действующих на систему, таких как демпфирование и управление.

Сети способны, например, к обучению на смоделированных данных обыкновенного или в частных производных дифференциального уравнения. 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 МО 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 учится на данных, руководствуясь при этом информацией о применяемых некоторых физических свойствах или законах. Такие модели можно в дальнейшем применять для адаптивного управления.

Таким образом, рассматривается использование ЛНС для изучения моделей в пространстве состояний.

Следовательно, 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 и следует из уравнения Эйлера-Лагранжа. ЛНС также имеет возможность обучаться на произвольных данных и превосходит простые модели ИНС с меньшим количеством данных. В результате становится лучшим методом для изучения физических систем на основе наблюдаемых данных.

### 2.1. Глубокие физически информированные нейронные сети (ФИНС).

Напомним, что математически глубокая нейронная сеть (ГНС) представляет собой особый выбор композиционной функции. Простейшей нейронной сетью (НС) является НС с прямой связью (ПС-НС), также называемая многослойным персептроном (МСП), которая рекурсивно применяет линейные и нелинейные преобразования к входным данным. Хотя за последние десятилетия было разработано множество различных типов НС, таких как сверточная нейронная сеть (С-НС) и рекуррентная нейронная сеть (Р-НС), здесь кратко рассмотрим пример ПС-НС, которого достаточно для большинства задач уравнений с частными производными (УЧП), и остаточную НС, которую легче дообучить для ГНС. Однако легко использовать другие типы НС.

Пусть  $N^L(x): \mathbb{R}^{d_{\text{вх}}} \rightarrow \mathbb{R}^{d_{\text{вых}}}$  есть НС  $L$ -слоя или НС с  $(L - 1)$  - скрытыми слоями с  $N_\ell$  нейронами в  $\ell$ -м слое ( $N_0 = d_{\text{вх}}, N_L = d_{\text{вых}}$ ). Обозначим весовую матрицу и вектор смещения в  $\ell$ -м слое через  $W^\ell \in \mathbb{R}^{N_\ell \times N_{\ell-1}}$  и  $b^\ell \in \mathbb{R}^{N_\ell}$  соответственно. Учитывая нелинейную функцию активации  $\sigma$ , которая применяется поэлементно, ПНС рекурсивно определяется следующим образом:

- Слой входа  $N^0(x) = x \in \mathbb{R}^{d_{\text{вх}}}$ ,
- Скрытые слои  $N^\ell(x) = \sigma(W^\ell N^{\ell-1}(x) + b^\ell) \in \mathbb{R}^{N_\ell}$  для  $1 \leq \ell \leq L-1$ ,
- Слой выхода  $N^L(x) = (W^L N^{L-1}(x) + b^L) \in \mathbb{R}^{d_{\text{вых}}}$ , визуализация НС на рис. 9.

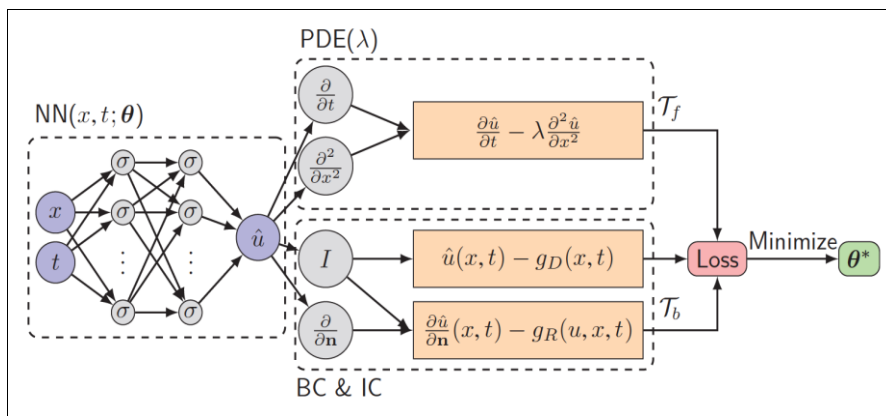


Рис. 9. Схема ФИНС для решения уравнения диффузии

Обычно используемые функции активации включают логистическую сигмоиду  $1/(1 + e^{-x})$ , гиперболический тангенс (tanh) и спрямленную линейную единицу (ReLU,  $\max\{x, 0\}$ ).

**Пример: Нелинейная аппроксимация функций.** В общем, нелинейная аппроксимация идентифицирует оптимальную аппроксимацию как линейную композицию некоторых нелинейных аппроксимаций. Пусть  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$  и  $u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  — целевая функция в гильбертовом пространстве, ассоциированная с некоторой собственной нормой  $\|\cdot\|_*$ , такой как норма  $L^2$  или  $L^\infty$ . Глубокая нейронная сеть (ГНС), состоящая из  $L$  скрытых слоев с  $N_i$  нейронами в каждом слое и функцией

активации  $\sigma$ , представляет собой усиленное нелинейное приближение, которое принимает композиционную форму

$$u(x) \approx \tilde{u}(x) = l \circ T^{(L)} \circ T^{(L-1)} \circ \dots \circ T^{(1)}(x).$$

Нелинейное отображение в каждом скрытом слое  $i = 1, 2, \dots, L$  есть  $T^{(i)}(x) = \sigma(W_i x + b_i)$  с весами  $W_i \in \mathbb{R}^{N_i \times N_{i-1}}$  и смещениями  $b_i \in \mathbb{R}^{N_i}$ , где  $N_i$  — входная размерность. Выход последнего скрытого слоя, наконец, отображается через линейное отображение  $l: \mathbb{R}^{N_L} \rightarrow \mathbb{R}$ , на выход сети. Заметим, что функция активации  $\sigma$  имеет одинаковый вид для каждого нейрона, однако она также может иметь различную размерность домена и изображения в зависимости от структуры сети. Для конкретной структуры сети (глубина  $L$  и ширина  $N$ ) и выбора функции активации ГНС ищет аппроксимацию, которая минимизирует целевую функцию, которая измеряет несоответствие выхода НС и заданной целевой функции, т. е.  $\|u(x) - \tilde{u}(x)\|_*$ . Следовательно, аппроксимированная функция получается, как

$$u^*(x) = \arg \min_{W, b} \|u(x) - \tilde{u}(x)\|_*.$$

Это проблема минимизации, однако, нетривиальна, так как обычно ГНС используют многомерные входные данные и имеют глубокие структуры, которые могут привести к некоторым числовым проблемам, таким как ловушки локального минимума, и на практике в качестве приближения можно найти  $\hat{u}(x) \approx \tilde{u}(x)$ . Следовательно, точность ГНС можно охарактеризовать, разделив ожидаемую ошибку на три основных типа: ошибка аппроксимации  $\|\tilde{u} - u\|_*$ , обобщенная ошибка  $\|u^* - \tilde{u}\|_*$  и ошибка оптимизации  $\|\hat{u} - u^*\|_*$ . В литературе имеются попытки идентифицировать эти различные источники ошибок и разработать надлежащую основу для анализа ошибок ГНС. Однако достижение оптимального приближения зависит от многих факторов и до сих пор остается открытой проблемой.

**Примечание.** Репрезентативные способности НС хорошо известны. Согласно теореме об универсальной аппроксимации, любая непрерывная функция может быть сколь угодно точно аппроксимирована многослойным персептроном только с одним скрытым слоем и конечным числом нейронов. Хотя НС могут компактно выражать очень сложные функции, определение точных параметров (весов и смещений), необходимых для решения конкретного УЧП, может быть затруднено. Кроме того, определение подходящей архитектуры ИНС может оказаться сложной задачей. Существует два подхода: неглубокие обучающие сети, которые имеют один скрытый слой и могут по-прежнему создавать любую нелинейную непрерывную функцию, и глубокие нейронные сети (ГНС), тип ИНС, который использует более двух слоев НС для моделирования сложных отношений.

Основные архитектуры включают полностью связанные сети прямой связи, сверточные нейронные сети и рекуррентные нейронные сети. Другие более современные архитектуры включают *Auto-Encoder (AE)*, *Deep Belief Network (DBN)*, *Generative Adversarial Network (GAN)* и *Bayesian Deep Learning (BDL)*.

Действительно, на основе некоторых из этих сетей были исследованы различные расширения ФИНС. Примером может служить оценка неопределенности решения ФИНС с использованием байесовских НС. В качестве альтернативы, при обучении можно использовать фильтры для построения невязки реального уравнения в ФИНС — подобной функции потерь. Определим математическую основу для характеристики различных сетей. Общая ГНС с  $L$  слоями может быть представлена как композиция  $L$  функций  $f_i(x_i, q_i)$ , где  $x_i$  известны как переменные состояния, а  $\theta_i$  обозначает набор параметров для  $i$ -го слоя.

Итак, функция  $u(x)$  аппроксимируется как  $u_{\theta}(x) = f_L \circ f_{L-1} \circ \dots \circ f_1(x)$ , где каждое  $f_i$  определено на двух пространствах внутреннего произведения  $E_i$  и  $H_i$ , т.е.  $f_i \in E_i \times H_i$ , а состав слоев, представленный  $\circ$ , следует читать как  $f_2 \circ f_1(x) = f_2(f_1(x))$ .

Модели физических объектов описываются часто существенно нелинейными дифференциальными уравнениями в обыкновенных или частных производных, решение которых вызывает трудности математического характера. Физически информированные нейронные сети (ФИНС – PINN – physics-informed neural networks) — это НС (НС), которые кодируют модельные уравнения, такие как дифференциальные уравнения в частных производных (УЧП), как компонент самой НС. В настоящее время ФИНС используются для решения УЧП, дробных уравнений и интегро-дифференциальных уравнений. Эта новая методология возникла как многозадачная структура обучения, в которой НС должна соответствовать наблюдаемым данным при уменьшении остатка УЧП. Рассмотрим модели ФИНС, чтобы доступно и в наглядной форме охарактеризовать эти сети и связанные с ними преимущества и недостатки.

Исследование показывает, что большинство разработок ФИНС сосредоточено на настройке самой ФИНС с помощью различных функций активации, методов градиентной оптимизации, структур НС и структур функций потерь. Несмотря на широкий спектр приложений, для которых использовались ФИНС, демонстрируя свою способность быть более осуществимой в некоторых контекстах, чем классические численные методы, такие как метод конечных элементов, существуют теоретические проблемы, которые остаются нерешенными.

Таким образом, ФИНС – это научно обоснованная техника ГМО, используемая для решения задач, связанных с дифференциальными уравнениями в частных производных (УЧП). ФИНС аппроксимируют решения УЧП, обучая НС минимизировать функцию потерь; включает члены, отражающие начальные и граничные условия вдоль границы пространственно-временной области, а также невязку УЧП в выбранных точках области (называемых точкой коллокации). ФИНС – это сети с глубоким обучением, которые, учитывая входную точку в области интегрирования, после обучения производят оценочное решение в этой точке дифференциального уравнения. Включение остаточной сети, которая кодирует основные физические уравнения, является значительным новшеством в развитии ФИНС.

Основная концепция обучения ФИНС заключается в том, что ее можно рассматривать как неконтролируемую стратегию, которая не требует помеченных данных, таких как результаты предыдущих симуляций или экспериментов. Алгоритм ФИНС, по сути, представляет собой бессеточный метод, который находит решения в частных производных путем преобразования проблемы прямого решения основных уравнений в задачу оптимизации функции потерь. Алгоритм работает путем интеграции математической модели в сеть и усиления функции потерь остаточным членом из основного уравнения, который действует как штраф для ограничения пространства приемлемых решений.

Следовательно, ФИНС аппроксимируют решения УЧП, обучая РС методом минимизации функции потерь; включает члены, отражающие начальные и граничные условия вдоль границы пространственно-временной области, а также невязку УЧП в выбранных точках области коллокации. ФИНС — это сети с глубоким обучением, которые, учитывая входную точку в области интеграции, после обучения производят оценочное решение в этой точке решения дифференциального уравнения. Включение остаточной сети, которая кодирует основные физические уравнения, является значительным преимуществом структуры ФИНС.

ФИНС могут решать проблемы, для которых имеется ограниченное количество данных, например, зашумленные наблюдения и экспериментальные данные натуральных измерений. Поскольку они могут использовать известные данные, опираясь на интерпретацию любого заданного физического закона, определяемого общими нелинейными УЧП, ФИНС также можно рассматривать как НС, которые решают задачи обучения с учителем. ФИНС могут решать дифференциальные уравнения, выраженные в общей форме, например, интегро-дифференциальные уравнения (ИДУ), уравнения дробного порядка или стохастические дифференциальные уравнения (СДУ).

Таким образом, ФИНС могут решать дифференциальные уравнения, выраженные в самой общей форме, например:



$$\mathcal{F}(u(z); \gamma) = f(z), \quad z \text{ in } \Omega; \quad \mathcal{B}(u(z)) = g(z), \quad z \text{ in } \partial\Omega,$$

определенный на области  $\Omega \subset R^d$  с границей  $\partial\Omega$ . Здесь  $z := [x_1, \dots, x_n; t]$  указывает вектор пространственно-временных координат,  $u$  представляет неизвестное решение,  $\gamma$  – параметры, относящиеся к свойствам физического объекта,  $f$  – функция, идентифицирующая данные задачи, а  $\mathcal{F}$  – нелинейный дифференциальный оператор. Наконец, поскольку начальное условие фактически можно рассматривать как тип граничного условия Дирихле в пространственно-временной области, можно обозначить  $\mathcal{B}$  как оператор, указывающий произвольные начальные или граничные условия, связанные с задачей, и  $g$  граничную функцию; где граничными условиями могут быть, например, Дирихле, Неймана, Робена или периодические граничные условия.

Формализация приведенных общего вида уравнений позволяет описать многочисленные физические системы, включающие как прямые, так и обратные задачи. Цель прямых задач — найти функцию  $u$  для каждого  $z$ , где  $\gamma$  — заданные параметры. В случае обратной задачи по данным также необходимо определить  $\gamma$ .

В методологии ФИНС функция  $u(z)$  вычисляется с помощью НС, параметризованной набором параметров  $\theta$ , что приводит к приближению  $\hat{u}_\theta(z) \approx u(z)$ , где  $(\hat{\cdot})_\theta$  обозначает НС-аппроксимацию, реализованную с  $\theta$ .

## 2.2. Глубокое машинное обучение на физически определенных данных – Гамильтоновы / Лагранжевы нейронные сети – введение

В контексте, когда прямые и обратные задачи анализируются в одной и той же структуре, и учитывая, что ФИНС может адекватно решить обе проблемы, будем использовать параметр  $\theta$  для представления как вектора всех неизвестных параметров в НС, которая представляет гибридную модель, так и неизвестных параметров  $\gamma$  в случае обратной задачи.

Свойство универсальной аппроксимации НС можно использовать для поиска решения некорректных задач, таких как те, которые связаны с УЧП. Рассматривая нелинейный параметрический частный дифференциал вида  $u_t + \mathcal{N}[u; \lambda] = 0$ , где  $\mathcal{N}[u; \lambda]$  является онлайн-линейным оператором, параметризованным  $\lambda$ , а  $u_t$  является производной по времени от функции  $u(t, x)$ . Можно определить остаточный член  $f(t, x)$  как левую часть приведенного уравнения, так что НС, которая минимизирует этот остаток, считается приближенным решением уравнения, т.е.

$$L(\theta; x) := u_t(\theta; t, x) + \mathcal{N}[u(\theta; t, x); \lambda], \quad \theta^* = \arg \min_\theta L(\theta; x).$$

В этом случае, и результатом является ГНС, которая кодирует отношения УЧП. Именно эта методология известна как ФИНС.

ФИНС, метод глубокого обучения, обучается одновременно как на данных, так и на основных дифференциальных уравнениях. Он хорошо подходит для решения прямых и обратных дифференциальных уравнений, управляющих физическими системами в различных областях, таких как механика жидкости, механика твердого тела и электромагнитная механика.

В таком контексте НС должна научиться аппроксимировать дифференциальные уравнения, находя  $\theta$ , которые определяют НС, минимизируя функцию потерь, которая зависит от дифференциального уравнения  $\mathcal{L}_F$ , граничных условий  $\mathcal{L}_B$  и, в конечном счете, некоторых известных экспериментальных данных  $\mathcal{L}_{Data}$ , каждое из которых адекватно взвешенный:

$$\theta^* = \arg \min_\theta (\omega_F L_F(\theta) + \omega_B L_B(\theta) + \omega_d L_{Data}(\theta)).$$

Таким образом, ФИНС действительно можно рассматривать как подход к обучению без учителя, когда ФИНС действительно обучаются исключительно с использованием физических уравнений и граничных условий для прямых задач; однако для обратных задач или когда некоторые физические свойства получены из данных, которые могут быть зашумленными, ФИНС можно рассматривать как методологию обучения с учителем. С помощью различных моделей и типов НС, используемые для

аппроксимации  $u(z)$ , информация, полученная с помощью  $\mathcal{F}$ , включается в модель, и НС обучается на основе уравнений и дополнительных заданных данных.

На рис. 10 обобщены все «строительные» блоки ФИНС, рассматриваемые в этом разделе. ФИНС состоит из трех компонентов: нейронной сети, физико-информированной сети и механизма обратной связи.

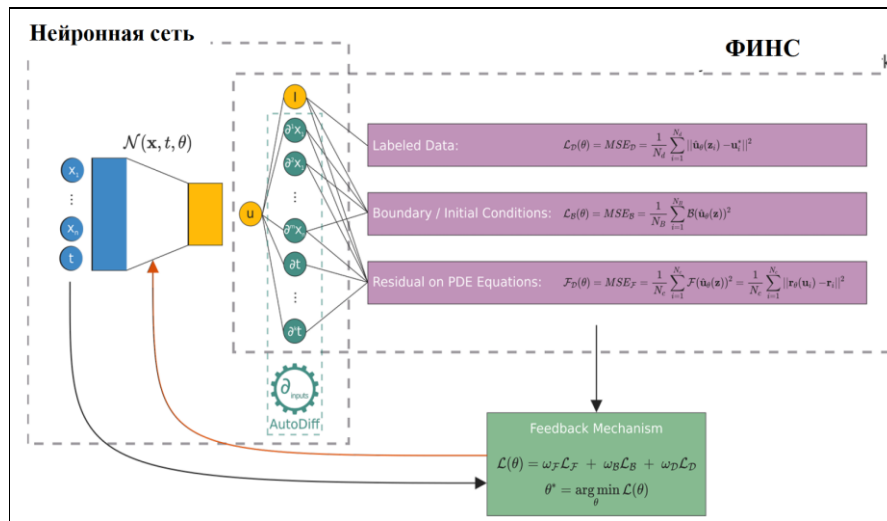


Рис. 10. «Строительные» блоки ФИНС [6]

ФИНС состоят из редуцированных дифференциальных уравнений, а также включают в структуру начальные и граничные условия. Входы сети (переменные) преобразуются в выходы сети (поле  $u$ ). Сеть определяется видом  $\theta$ . Вторая область – сеть с информацией о физических свойствах объекта исследования, которая принимает выходное поле  $u$  и вычисляет производную, используя заданные уравнения. Также оценивается граничное/начальное условие (если оно еще не было жестко закодировано в НС), а также вычисляются размеченные наблюдения данных (если есть какие-либо доступные данные). Последним шагом является механизм обратной связи, который минимизирует потери с помощью оптимизатора в соответствии с некоторой скоростью обучения, чтобы получить параметры НС.

Первый блок – это НС, формирующая  $\hat{u}_\theta$ , которая принимает векторные переменные  $z$  из уравнения движения и выдает значение поля  $u$ . Второй блок можно рассматривать как функциональную составляющую ФИНС, так как он вычисляет производную для определения редуцированных членов уравнения, а также членов начальных и граничных условий уравнения. Как правило, первые два блока связаны с помощью алгоритмического дифференцирования, которое используется для ввода физических уравнений в НС на этапе обучения. Таким образом, механизм обратной связи минимизирует потери в соответствии с некоторой скоростью обучения, чтобы зафиксировать вектор параметров  $\theta$  НС  $\hat{u}_\theta$ . Далее тип сети определяется как НС или функциональная сеть, получающая физическую информацию об объекте исследования.

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 использования таких предварительных знаний. 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 фактически ФИНС 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 изучаются из наблюдаемых данных [3,4].

Особенность ФИНС заключается в том, что изначально учитывают лежащее в основе описание уравнений в частных или обыкновенных производных, то есть физику проблемы вместо того, чтобы пытаться вывести решение на основе исключительно данных, то есть путем подгонки НС к набору пар «состояние – значение». С точки зрения применения ГМО для создания гибридных физических моделей возникли две основные парадигмы:

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

ФИНС включают в себя как УЧП, так и его начальные/граничные условия (мягкий ВС) в функции потерь при обучении, в то время как НС с физическими ограничениями, т. е. НС «без данных», применяют начальные/граничные условия (жесткий ВС) через пользовательскую архитектуру НС при встраивании УЧП в тренировочных потерях. Этот метод мягкой формы описан в *Raissi et al* (2019), где был придуман термин «физически информированные нейронные сети» (ФИНС – PINN). Кроме того, в этом обзоре аббревиатура PINN будет писаться в единственном числе, а не во множественном числе, поскольку она считается представителем семейства нейронных сетей того же типа. Поскольку статей о PINN больше, чем о PCNN, в этом обзоре основное внимание будет уделено PINN с некоторыми обсуждениями PCNN.

**Примечание.** Как отмечалось, 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 функциях 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 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 гамильтоновой 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 законах. Такие модели можно в дальнейшем применять для адаптивного управления. Таким образом, рассматривается использование ЛНС для изучения моделей в пространстве состояний.

Рассмотрим примеры применения методологии ФИНС

## 1. 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?

## **2. 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 (ГНС) методом минимизации заданной формы функции потерь предсказания.

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 ГНС 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. 11.

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.

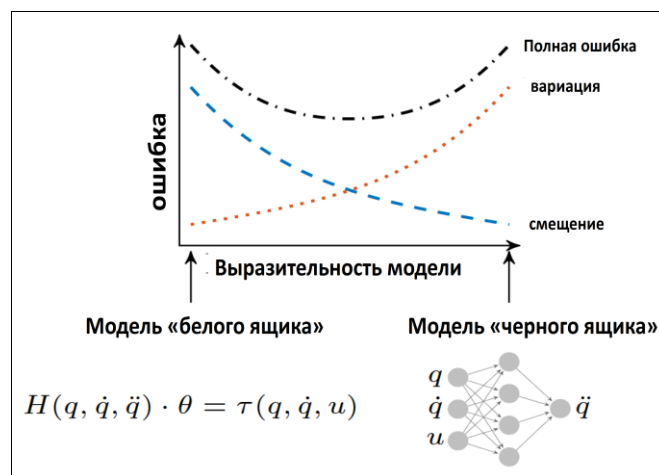


Рис. 11. Компромисс смещения и дисперсии оценки модели ОУ как функция репрезентативности описания модели

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.

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 фокусируется 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 (см., п. 3).

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 данных.

**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 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.

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 (ХАИ).

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.

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

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  $f_\theta$  может аппроксимировать динамику  $f$ , изучая данные о траектории  $z(t)$ .

#### 3.1 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  $\dot{z} = J \nabla H(z)$ ,  $J = \begin{bmatrix} 0 & I_{D/2} \\ -I_{D/2} & 0 \end{bmatrix}$ , где  $I_{D/2}$  единичная матрица 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  $H_\theta$  или  $L_\theta$ , 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  $f_{\vec{w}, \vec{b}}(\vec{x}): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  с параметрами  $\vec{w}, \vec{b}$ . В классической ГНС  $f_{\vec{w}, \vec{b}}(\vec{x})$  принимает вид  $\sigma \circ L_{\vec{w}, \vec{b}}$ , где  $L_{\vec{w}, \vec{b}}$  – аффинное преобразование, а  $\sigma$  – нелинейная функция активации. Эффективность ГНС следует из нелинейности функции активации. Без функций активации ГНС будут не чем иным, как аффинными преобразованиями.

### 3.2 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 МО. 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. 12): 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.

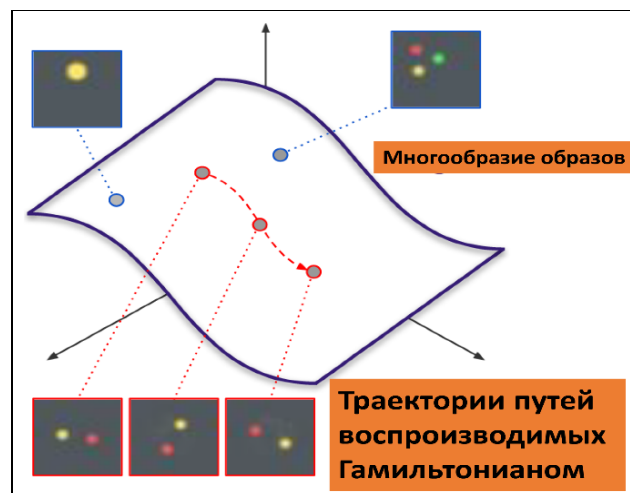


Рис. 12. Гипотеза гамильтонова многообразия

*[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 к гамильтоновой динамике]*

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. 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  $\Phi$  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

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

Выполнение 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

$$\dot{z} = P(z) J \nabla H(z). \tag{3}$$

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

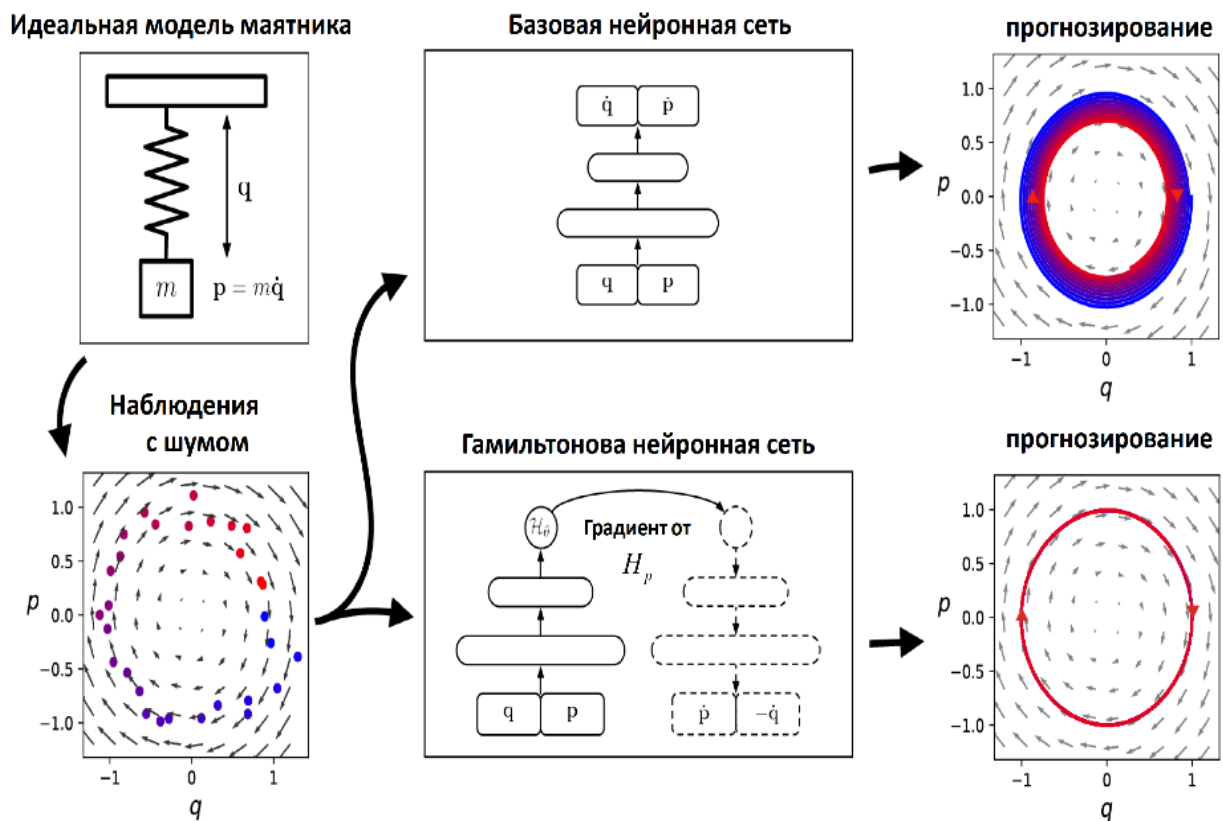


Рис. 13. Изучение гамильтониана системы масса-пружина [7]

[Переменные  $q$  и  $p$  соответствуют координатам положения и импульса]

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 научится точно сохранять количество, аналогичное полной энергии [7-9].

На рис. 14 приведена структура ФИНС для реализации диссипативной гамильтоновой нейронной сети (Д-ГНС –  $D-HNN$ ).  $D-HNN$  используют две нейронные сети для моделирования динамических систем.

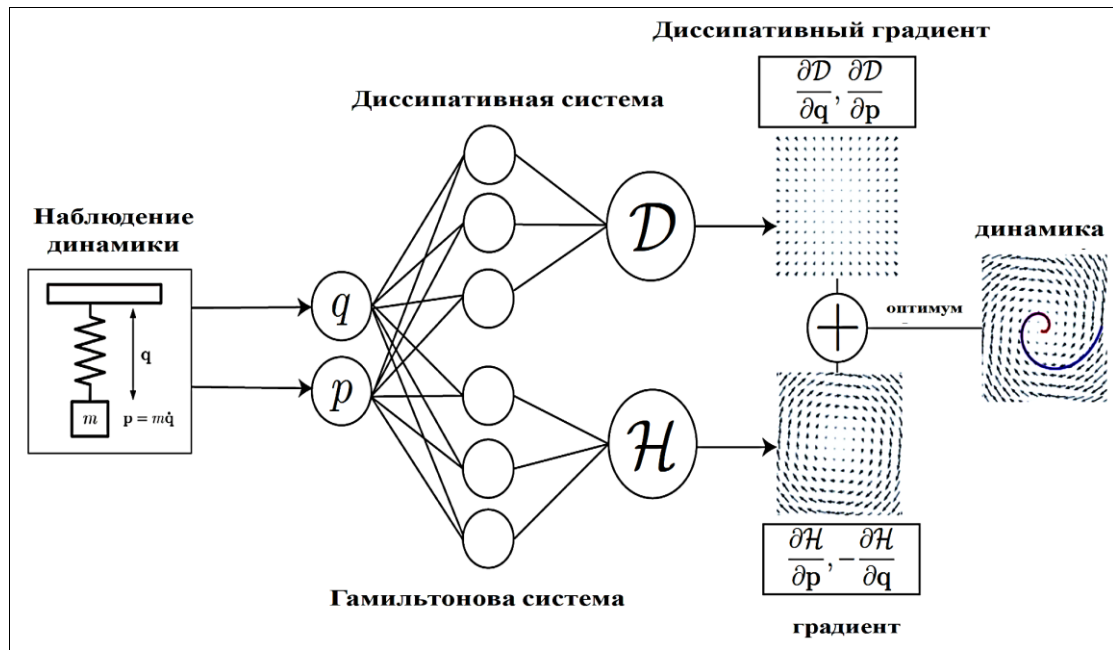


Рис. 14. Визуализация архитектуры диссипативной гамильтоновой нейронной сети (D-HNN)

Как и в случае с обычным *HNN*, параметризуем гамильтонову функцию  $H$  с помощью первой подсети и используем ее для моделирования части динамики системы (нижняя часть диаграммы). В отличие от обычного *HNN*, мы используем вторую подсеть, чтобы позволить нашей параметрической модели выводить вторую скалярную функцию,  $D$ , и использовать ее для получения обычного несимплектического градиента, который может быть использован для моделирования диссипативной динамики. Сумма этих двух полей может быть использована для моделирования динамических систем, которые обладают как консервативной, так и диссипативной динамикой: в данном случае демпфированной пружиной [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.

### 3.3 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 ускорения (рис.11).

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 [10].

*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 гамильтоновы 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  $(\nabla_{\dot{q}})_i \equiv \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}$ . 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  $\nabla$  – 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  $\ddot{q}$ :

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

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  $\ddot{x}_t^{\text{true}}$ .

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

Параметризация системного Лагранжиана НС (см. рис. 13), которая предсказывает вид лагранжиана, а затем получает значение ускорения в соответствии с уравнением (4), позволяет сформулировать параметры НС. Если  $\theta_L$  – это веса и смещения всей ЛНС на рис.13, 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.

В отличие от предыдущих подходов, метод [10-12] не ограничивает функциональную форму изученных энергий и позволяет создавать энергосберегающие модели для различных задач (Рис. 15).

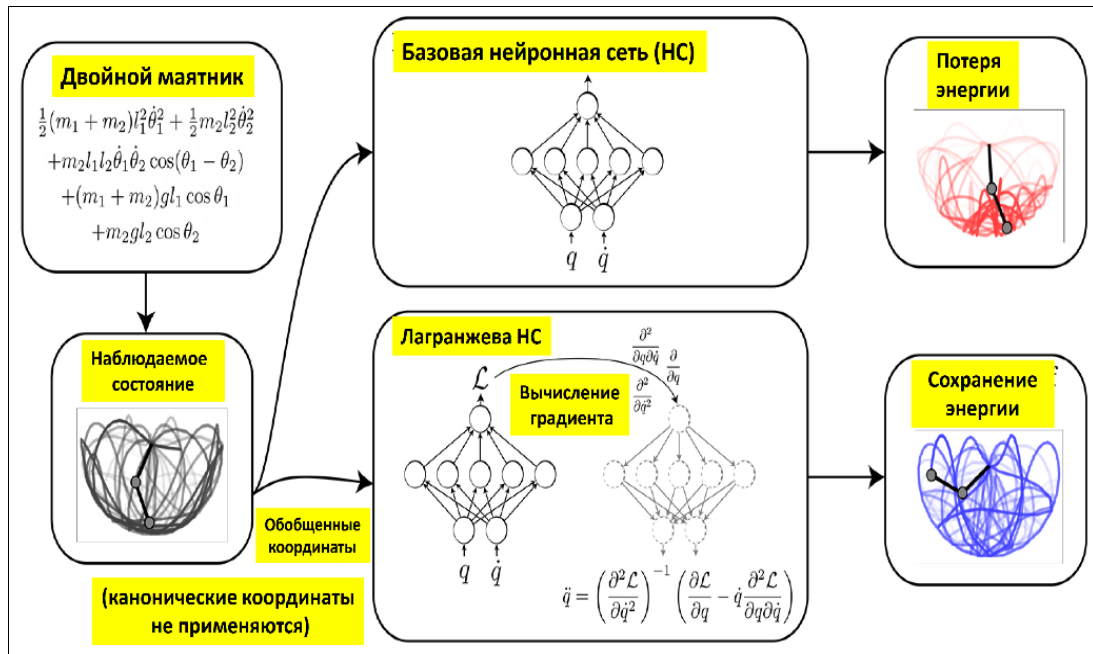


Рис. 15. Иллюстрация применения Лагранжиана для описания динамики физических систем, таких как двойной маятник (черный)

[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)]

Рассмотрим частные примеры применения Лагранжиана для описания динамики физических систем, рассмотренной на рис. 15.

#### 4. Примеры

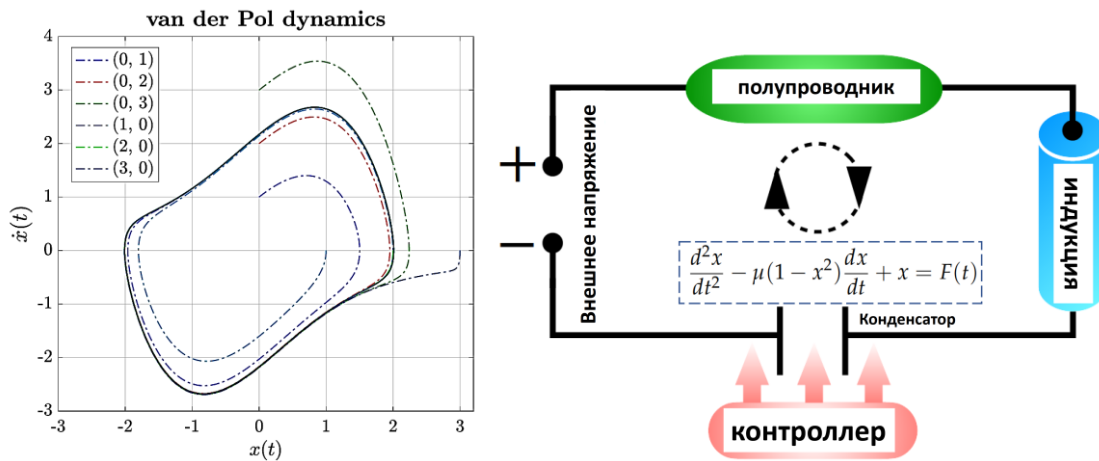
Рассмотрим частные примеры применения ЛНС для описания динамики физических систем, рассмотренной на рис. 5.

##### 4.1 Маятник с одной степенью свободы – осциллятор Ван дер Поля

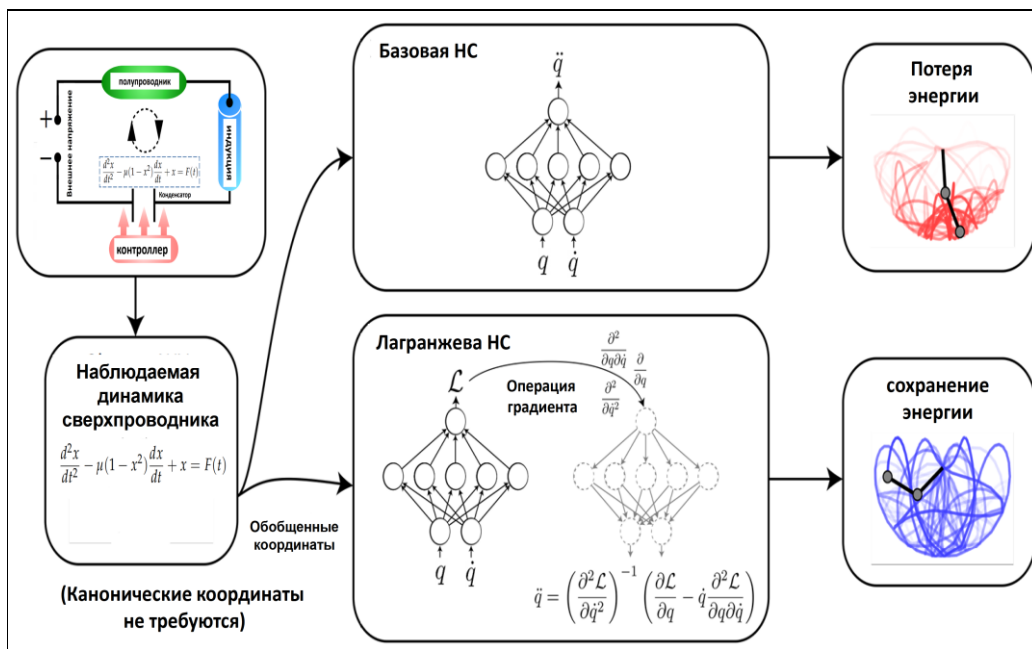
Динамика Ван дер Поля описывает колебательное поведение класса нелинейных уравнений, первоначально описывающих колебательные контуры с полупроводниками, в виде:

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

где  $F(t)$  – сила управления,  $x(t)$  называется состоянием,  $\dot{x}(t)$  – скорость, а  $\ddot{x}(t)$  – ускорение;  $\mu$  – 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.16(a): при наличии шести различных начальных точек все фазовые траектории сходятся к непостоянному предельному циклу с изменяющейся скоростью относительно их положений, что указывает на нестабильную фазу.



(а)



(б)

Рис. 16. 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

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 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 (ГНС). 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 ГНС 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:  $K_0(t) = t \subset \mathbb{R}^{d_{in}}$
- Внутренний (скрытый) слой:
- $K_L(t) = \sigma(w_L K_{L-1}(t) + b_L) \subset \mathbb{R}^{k^L}$ , for  $1 \leq L \leq L - 1$  (6)
- Выходной слой:  $K_L(t) = w_L K_{L-1} + b_L \subset \mathbb{R}^{d_{out}}$ , ( $x_{pred} \equiv K_L(t)$ )

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  $w_L \subset \mathbb{R}^{k^L \times k^{L-1}}$  и  $b_L \subset \mathbb{R}^{k^L}$ . Визуализация НС показана в синем поле на рис. 17.

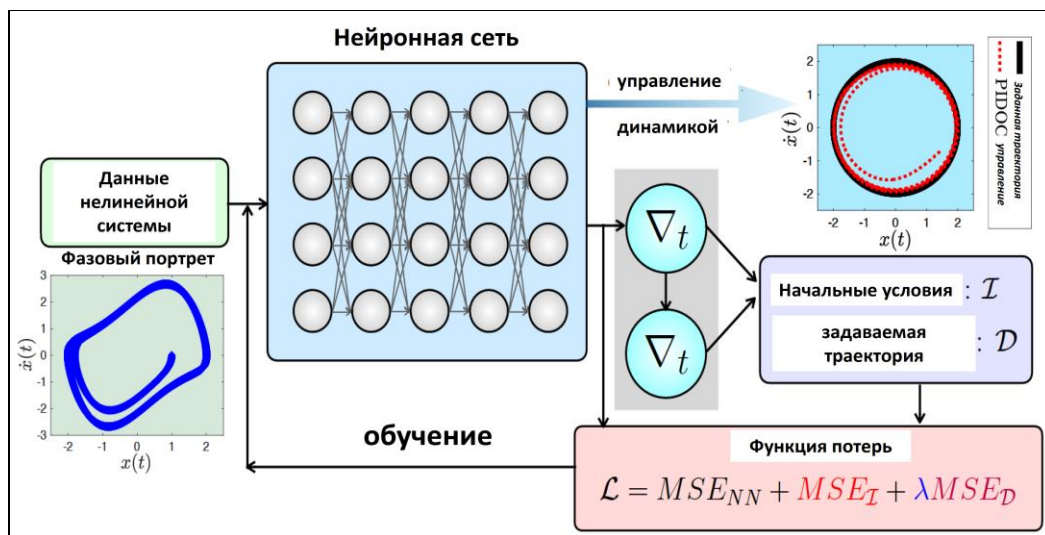


Рис. 17. Схематическая диаграмма платформы PIDOC на основе ФИНС.

*[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  $\lambda$  может увеличивать управляющий сигнал, который обеспечивает обратную связь со схемой глубокого обучения для изучения динамики и, таким образом, может выводить идеальную динамику]*

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.16(a)). 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 синусоидальной 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. 16, достигаются 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 МО 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 подходы 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  $I$ ,  $D$  и НС. Если никакие внешние ограничения или границы не применяются, проблема оптимизации, следовательно, принимает форму:  $\min_{t \in \square^{d_{out}}} L(t, p)$ . 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 ( $I$  и  $D$ ) и к красному прямоугольнику ( $L$ ), как показано на рис. 17. Максимальное количество итераций установлено равным  $2 \cdot 10^5$ . В формулировке *PIDOC*, функция потерь  $L$  рассчитывается на основе среднеквадратичных ошибок закодированной информации.

2. Физико-информированное управление. Реализация управляющих сигналов обеспечивается за счет физической информации, содержащейся в функцию 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 ( $MSE$ ) генерации поколения НС  $MSE_{НС}$ , начальных условий  $MSE_I$  и желаемой траектории  $MSE_D$ , умноженные на множитель Лагранжа  $\lambda$ , чтобы увеличить влияние управляющего сигнала:  $L = MSE_{NN} + MSE_I + MSE_D$ , 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  $MSE_I$  вычисляется как  $MSE$  между заданными начальными условиями  $D$  с предсказаниями системы  $x_{pred}$  в начале:  $MSE_I := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_{pred}^0 - x_D^0|^2$ , 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*:

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

Здесь  $MSE_D$  включает управление, а множитель  $\lambda$  позволяет настроить вес сигнала. Задача оптимизации, сформулированная, следовательно, может рассматриваться как многокритериальная оптимизация на основе градиента, поскольку цель управления может быть настроена с помощью  $\lambda$ . 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  $\Lambda$ , 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  $\Lambda$ , следует изменить уравнение так, чтобы потери НС содержали информацию об амплитуде траектории с теми же обучающими данными:

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

3. Анализ поведения системы. Систематическое поведение проверяется на основе фазового портрета, временной схемы положения  $x(t)$  и ускорения  $\ddot{x}(t)$ , как показано на рис. 18. Из рис. 18(A) 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. 18(B) видно, что схема управления PIDOC, показанная красной линией, демонстрирует фазовую разницу с требуемым маршрутом, показанным черной линией. На рис. 18(C) также видно, что схема, управляемая PIDOC, демонстрирует колебательный характер, как показано красной линией.

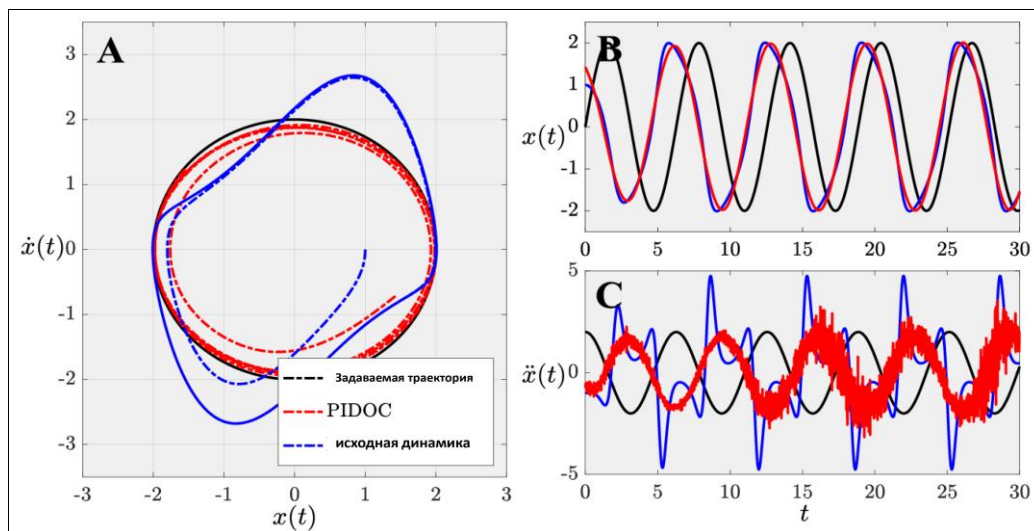


Рис. 18. Поведение системы при использовании PIDOC для управления динамикой Ван-дер-Поля применительно к задаче эталонного тестирования. (A) фазовый портрет желаемой траектории  $D$ , сигнал, управляемый PIDOC, и собственная динамика Ван-дер-Поля. (B) График положения  $\ddot{x}(t)$  в зависимости от времени  $t$ . (C) График ускорения  $\ddot{x}(t)$  в зависимости от времени  $t$

Из рис. 18 можно сделать вывод о трех характеристиках управления PIDOC: (1) PIDOC успешно реализовал управление для управления поведением системы на основе  $D$ ; (2) Динамика, управляемая PIDOC, имеет отставание по фазе от желаемых сигналов; (3) ускорение  $\ddot{x}(t)$  имеет флуктуационный характер. Разность фаз (рис.18(B)) связана с тем, что PIDOC стремится следовать заданным начальным позициям, которые закодированы. Стохастичность, наблюдаемая на рис.18(C), 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.18(В), члены более высокого порядка в ускорении  $\ddot{x}(t)$  увеличивают стохастичность сигнала [13].

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. 18(С).

#### 4.2 Двойной маятник

Эффективная реализация (1) представляет собой сложную техническую задачу. Чтобы обучить эту прямую модель, необходимо вычислить обратный гессиан  $(\nabla_{\dot{q}} \nabla_{\dot{q}}^T L)^{-1}$  (используется псевдообратный, 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  $10^{-2}$  соответственно (рис. 19).

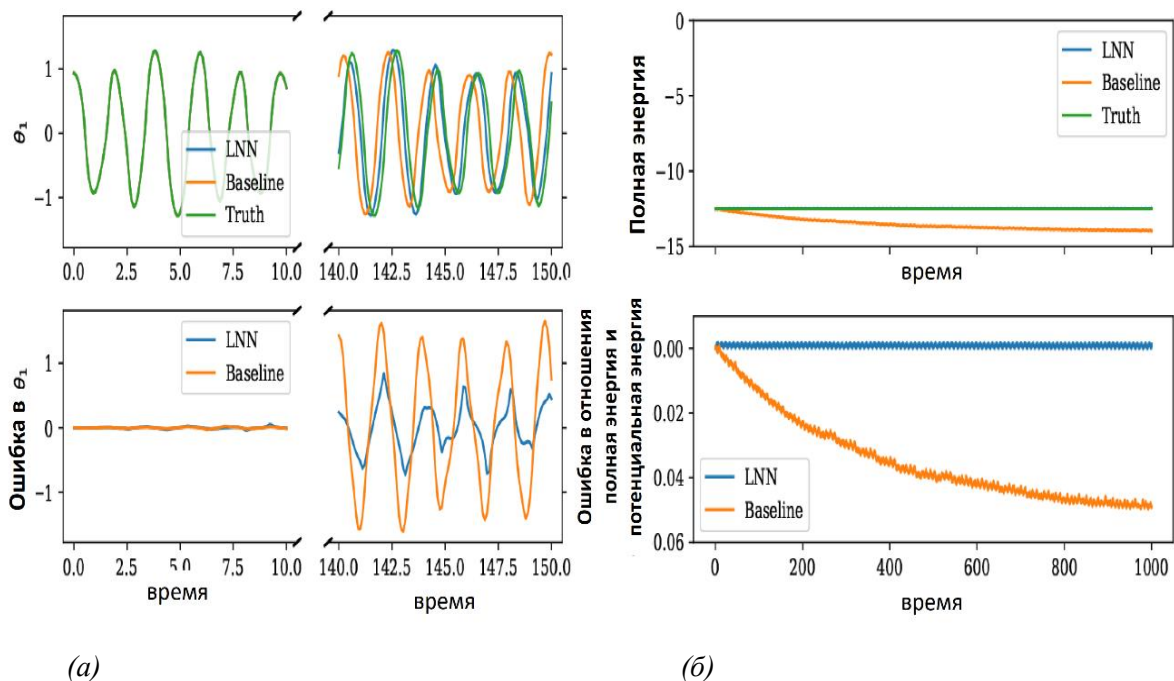


Рис. 19. Результаты моделирования двойного маятника (а) угловая ошибка; и (б) ошибка в энергии

[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 мновенные ускорения при более 600 000 случайных начальных условий]

Из Рис.19(а) видно, что ЛНС и базовая модель одинаково работают при моделировании динамики маятника за короткие периоды времени. Однако, рис.19(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.

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 характера исследуемой проблемы [15]. Возможно комбинировать слои, основанные на физике, и уровни, управляемые данными, образуя сложные архитектуры (смешивающие последовательные, параллельные, мостовые и другие).

##### 5. *Обобщенные гамильтоновы системы*

Фреймворк *port-Hamiltonian* (*pH*) – порт-Гамильтониан (см. [16]) нацелен на моделирование и управление физическими динамическими системами существенно иным способом, чем это делает большинство сообществ систем управления. Он использует такие понятия, как потоки мощности и энергия, чтобы заставить модель следовать физическим законам, а не сигналам, которые можно рассматривать как величины, ‘текущие по стрелкам’ обычного представления динамических систем «вход-выход» на блок-схеме. Он основан на двух классических структурах: 1) Парадигма моделирования на основе портов, введенная Х. Пейнтером в формализме графа связей, которая описывает сложную систему как взаимосвязь более простых атомных единиц, обменивающихся энергией; 2) Гамильтоновский математический формализм, который является одной из двух основных методологий (другой является лагранжев подход) для моделирования физических систем, и в нем подчеркивается геометрическая роль фазового пространства и гамильтоновой функции (представляющей общую запасенную энергию) в качестве строительных блоков для описания физических систем.

Базис основан на двух классических концепциях:

1. Парадигма моделирования на основе портов, введенная Х. Пейнтером в формализме графа связей, которая описывает сложную систему как взаимосвязь более простых атомарных единиц, обменивающихся энергией.
2. Гамильтонов математический формализм, который является одной из двух основных методологий (другой является лагранжев подход) для моделирования физических систем, и в нем подчеркивается геометрическая роль фазового пространства и гамильтоновой функции (представляющей общую запасенную энергию) в качестве строительных блоков для описания механических систем. На практике с использованием этой формулировки моделируются только замкнутые или изолированные системы, т.е. системы, для которых гамильтониан является сохраняющейся величиной вдоль движения.

Фреймворк *pH* элегантно синтезирует две идеи: он расширяет геометрическую гамильтонову формулировку на открытые системы любой физической области, т.е. на системы, которые следуют классической гамильтоновой динамике, если они изолированы (если входные данные равны нулю), но оснащены совмещенными парами «вход–выход». Они обеспечивают взаимосвязь с другими системами и возможность включения диссипации энергии в конструкцию.

Таким образом, становится возможным моделировать все более крупные сети, в которых передача энергии между подсистемами систематически контролируется и, возможно, используется в целях управления. Это энергетическое модульное свойство не присуще классическим подходам к моделированию блок-схем «вход–выход», которые, в отличие от систем *pH*, (i) не отражают физическую природу законов сохранения (не представляют автономную гамильтонову структуру), (ii) представляют фиксированный и произвольный выбор причинности с самого начала (существует является фиксированным и нефизическим выбором входных и выходных данных).

Поскольку сравнительные модели *pH* являются акаузальными, в том смысле, что каждая подсистема содержит только конститутивные отношения, описывающие, как эволюционируют ее переменные, не навязывая, что является входными данными, а что выходными. Отдельные конститутивные отношения системы классифицируются на основе их энергетического поведения на системы накопления энергии, рассеивания энергии, поставщика энергии или направления энергии. Последний тип кодирует структуру непрерывной сети питания системы, описывая, как ограничиваются потоки энергии, и математически моделируется так называемой структурой Дирака, обобщающей структуру Пуассона, свойственную классической гамильтоновой трактовке (см. главу

3). Наличие нелинейностей в системе закодировано либо в определяющих соотношениях, либо в структурах Дирака с модуляцией состояния. Это одно из самых мощных свойств систем  $pN$ : нет концептуального увеличения сложности, когда требуется моделировать нелинейные системы. Это представляет собой существенное отличие по отношению к классическим подходам теории управления, которые, как правило, классифицируют природу систем на основе формы уравнений, а не лежащих в их основе геометрических свойств.

Взаимодействие между двумя системами характеризуется эффектом обмена энергией между ними. Это взаимодействие происходит через вышеупомянутые совмещенные пары «вход–выход», которые образуют порт питания. Каждый порт питания состоит из двух двойственных переменных, называемых усилием и потоком, двойственное сопряжение которых представляет мощность, протекающую между двумя взаимодействующими системами (см. рис. 20).

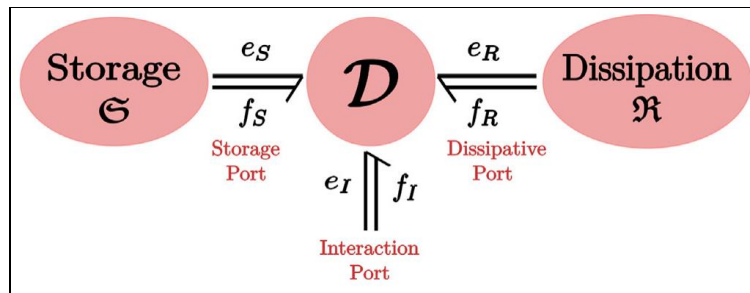


Рис. 20. Порт-гамильтонова система, состоящая из подсистемы накопления энергии, подсистемы рассеивания энергии, порта внешнего взаимодействия, в дополнение к структуре Дирака, которая действует как элемент потока энергии

Определяя эти порты как естественные, геометрические, дуальные структуры, которые присутствуют во всех областях физики, и используя их в качестве основы для взаимосвязи, можно естественным образом описывать системы любого вида и измерения как естественную взаимосвязь частей или явлений. Математика, в которой разрабатывается фреймворк, использует бескоординатный язык дифференциальной геометрии, а не векторное исчисление, которое зависит от конкретной системы координат. Это обеспечивает элегантное обобщение теории  $pN$  на гладкие многообразия и бесконечномерные системы. Фактически, системы  $pN$  конструктивно подходят для работы с распределенными системами с границами, через которые осуществляется обмен ненулевой энергией. Это фундаментальная особенность моделирования взмахов, обусловленная взаимодействием между гибкой механической областью и аэродинамической областью. Кроме того, в отличие от классических подходов, фреймворк может использоваться для представления взаимосвязей конечных и бесконечномерных систем. Такая возможность была продемонстрирована, например, при моделировании роботизированных манипуляторов со смешанными жесткими и гибкими звеньями и взаимосвязанных распределенных и сосредоточенных систем (например, гибкая пластина, приваренная к жесткому стержню).

Ключевым моментом в применении метода обобщенной гамильтоновой функции является выражение системы в виде обобщенной гамильтоновой системы с диссипацией, а затем устранение не диссипативной части с помощью обратной связи по состоянию, чтобы получить гамильтонову систему с диссипацией. Обобщенная гамильтонова форма нелинейной системы достижима, если матрица Якоби линеаризованной системы не особая. Обобщенный гамильтониан достижим для сингулярной матрицы Якоби, если диагональные основные блоки не особые. Каждая управляющая аффинная динамическая система может быть реализована в виде диссипативного (обобщенного) Гамильтониана при условии, что линеаризованная системы управляема. В приложениях для разработки систем управления термодинамические свойства системы затрудняют процесс нахождения надлежащей обобщенной гамильтоновой формы. Причина в том, что диссипативная и консервативная структура этой системы не является явной. Был представлен подход к построению обобщенного гамильтониана термомеханических систем, основанный на энтропийной формулировке интенсивных и экстенсивных переменных. Также эта структура была применена для изучения сетей реакций.

Математическое представление обобщенных гамильтоновых систем выглядит следующим образом. Рассмотрим динамическую систему без возбуждения  $\dot{x} = f(x) + g(x)u$ . Говорят, что рассматриваемая система имеет обобщенную гамильтонову реализацию (*GHR – generalized Hamilton realization*), если существует подходящая координатная карта и гамильтонова функция  $H$ , такая, что система может быть выражена как  $\dot{x} = Q(x)\nabla H$ , где  $\nabla H = \frac{\partial H}{\partial x}$ . Если структурная матрица  $Q(x)$  может быть выражена как  $Q(x) = J(x) - R(x)$  с кососимметричной матрицей  $J(x)$  и положительной полуопределенной симметричной матрицей  $R(x)$ , то система называется диссипативной гамильтоновой реализацией (*DHR – dissipative Hamilton realization*). Кроме того, если  $R(x) > 0$ , система называется строго *DHR*.

Говорят, что управляемая динамическая система  $\dot{x} = f(x) + g(x)u$  с  $f(0) = 0$  имеет гамильтонову реализацию с обратной связью по состоянию, если существует подходящий закон обратной связи по состоянию  $u = \alpha(x) + g(x)v$ , такой, что замкнутая система может быть выражена как  $\dot{x} = Q(x)\nabla H + g(x)v$ . Если  $Q(x)$  может быть выражено как  $Q(x) = J(x) - R(x)$ , при этом  $J(x)$  кососимметрично и  $R(x) \geq 0$  ( $> 0$ ), то управляемая система называется строго *DHR* с обратной связью.

### 5.1. Энергетические системы

Существует проблема, известная как обобщенная диссипация при стабилизации систем с управлением балансировкой энергии. Это препятствие в основном означает, что рассеивание энергии системой для стабилизации не ограничено или, альтернативно, количество энергии, извлекаемой из контроллера для стабилизации системы в желаемом равновесии, не является конечным. Чтобы преодолеть эту проблему, представили альтернативную парадигму формирования мощности. В которой стабилизация достигается формированием функции, близкой к мощности, вместо энергетической функции. Это послужило мотивацией для внедрения основанного на мощности модельного представления для динамических систем. Первоначально эта форма динамики была получена Брайтоном и Мозером для полных обратных нелинейных сетей.

Основная идея заключалась в том, что их поведение можно описать как градиентную систему, связанную со скалярной функцией, называемой смешанным потенциалом. Применение в технологическом инжиниринге изучалось различными исследователями. Было разработано системное представление неизотермического (*CSTR*) метода Брайтона-Мозера, а затем было предоставлено решение, основанное на системе *PDE*, основанной на методе управления формированием мощности. Критерий термодинамической стабильности был разработан для неизотермических *CSTR* в дополнение к связям между формулировкой Брайтона-Мозера и портом (псевдо) Гамильтоново моделирование *CSTR*.

Ключевым результатом стало решение по формуле Брайтона-Мозера, которое можно легко найти, используя предложенный критерий. Другое применение – системы отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха (ОВКВ) для зданий и т.д. Системная динамика для степенного представления имеет следующий вид:  $Q(x)\dot{x} = \nabla P(x) + G(x)u$ , где  $Q: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  – не сингулярная квадратная матричная функция,  $P: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  – скалярная функция класса  $C^2$ ,  $G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ , – матричная функция. Кроме того, симметричная часть матрицы  $Q(x)$  является отрицательно полуопределенной, т.е.  $Q(x) + Q^T(x) \leq 0$ . Функция  $P(x)$  называется потенциальной функцией. Путем идентификации аффинной системы управления и системы, основанной на мощности, получены следующие соотношения  $\nabla P(x) = Q(x)f(x)$ ,  $G(x) = Q(x)g(x)$ . Необходимыми и достаточными условиями существования условия  $Q(x)\dot{x} = \nabla P(x) + G(x)u$  является симметрия матрицы Гессияна  $\mathbb{H}(P)$  от  $P(x)$ :  $\mathbb{H}(P) = (\mathbb{H}(P))^T$ . Следует отметить, что формулировка Брайтона-Мозера в целом требует некоторых сложных математических вычислений.

### 5.2. Порт-гамильтоновы системы

Порт-гамильтонова система (*pH*) является еще одним важным энергетическим представлением динамической системы, которое было первоначально введено Машке и ван де Шафтом и далее развито Ортегой и др. Этот класс систем был получен из сетевого моделирования физических систем в различных физических областях. Использование этой структуры описывает широкий спектр динамических систем, включая процессы управления, и дает четкое соотношение между динамикой и

энергией системы. Эти системы наделены свойствами пассивности и очевидной системной структурой, позволяющей энергетическую интерпретацию этих систем, что, по сути, является следствием их системной формулировки. Они определяются в терминах гамильтоновой функции вместе с двумя геометрическими структурами (соответствующими, соответственно, энергосберегающей взаимосвязи и рассеянию энергии), которые таковы, что гамильтонова функция автоматически удовлетворяет неравенству рассеяния. Основной предпосылкой этого подхода является альтернативная точка зрения, которая фокусируется на взаимосвязи, описываемой этими моделями, что облегчает изучение проблем стабильности и управления взаимосвязанными системами.

Действительно, гамильтонова функция в системах  $pH$  представляет собой полную энергию, потенциальную и кинетическую энергию в физических системах и может играть роль функции Ляпунова для системы. Однако, когда система управляется внешним воздействием, гамильтонова функция не обязательно имеет минимум в желаемой рабочей точке. В этом случае можно использовать предварительную обратную связь и сформировать гамильтонову функцию таким образом, чтобы замкнутая система имела гамильтонову структуру с модифицированной функцией для обеспечения стабильности. Кроме того, при некоторых условиях обнаружения также обеспечивается асимптотическая стабильность.

В системах управления, в отличие от большинства механических и электрических систем, энергия не имеет четкого значения. Это происходит главным образом из-за термодинамических свойств систем управления, которые препятствуют четкой интерпретации гамильтониана или функции Ляпунова. Однако функция сохранения не всегда должна нести явный физический смысл, и любые положительные (полу) определенные функции фактически могут рассматриваться как функция сохранения, где понятие физической энергии становится абстрактной энергией, т.е. неявной энергией. Этот факт побудил многих исследователей применять энергетический анализ для процессов управления.

Сначала мы кратко рассмотрим общие сведения о методах управления  $pH$  системами.

Порт ввода-вывода-гамильтонова система с  $n$ -мерным многообразием пространства состояний  $\mathcal{D}$ , входным и выходным пространствами  $\mathcal{U} = \mathcal{Y} = \mathbb{R}^m$  и гамильтонианом  $H: \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$  задается в виде

$$\dot{x} = \left[ J(x) - R(x) \right] \frac{\partial H}{\partial x}(x) + g(x)u, \quad y = g^T(x) \frac{\partial H}{\partial x}(x),$$

где  $n \times n$  матриц  $J(x)$ ,  $R(x)$  удовлетворяют  $J(x) = -J^T(x)$  и  $R(x) = R^T(x) \geq 0$ .

В определении системы  $pH$  играют роль две геометрические структуры в пространстве состояний  $\mathcal{D}$ : внутренняя структура взаимосвязи, заданная  $J(x)$ , которая благодаря косой симметрии является энергосберегающей, и резистивная структура, заданная  $R(x)$ , которая благодаря не отрицательности отвечает за внутреннюю диссипацию из энергии. Из этого сразу следует  $\frac{dH}{dt}(x(t)) \leq u^T(t)y(t)$ , что подразумевается пассивность, если  $H \geq 0$ . Гамильтониан  $H$  равен общей запасенной энергии системы, в то время как  $u^T y$  – это мощность, подаваемая извне. В линейных системах преобразование динамической системы в форму  $pH$  осуществляется просто, но для нелинейных систем задача является сложной.

Интересным свойством этого класса систем является то, что гамильтонова функция  $H(x)$  может играть роль функции Ляпунова для анализа устойчивости, т.е. если  $H(x)$  допускает строгий минимум при  $x^* = 0$ , то  $x^*$  является устойчивым равновесием систем с неопределенным состоянием. Фактически, выходной сигнал  $y$  по этой причине называется пассивным выходным сигналом и может использоваться для достижения асимптотической устойчивости системы с помощью обратной связи  $\dot{x} = \left[ J(x) - R(x) \right] \nabla H(x)$ . А именно, обратная связь  $u = -Ky$  с  $K > 0$  превращает равенство диссипативных сил в

$$\dot{H}(x) = -\nabla H^T(x) \left( R(x) + g^T(x)Kg(x) \right) \nabla H(x).$$

Обратная связь  $u = -Ku$  изменяет матрицу демпфирования  $R(x)$  системы рН на  $\bar{R}(x)$  и, следовательно, называется демпфирующей инъекцией. Однако точка, в которой энергия разомкнутого контура минимальна, не обязательно представляет практический интерес, и вводится управление системой вокруг некоторой ненулевой точки равновесия, скажем,  $x^*$ .

Чтобы расширить класс систем, для которых могут быть применены методы проектирования управления с обратной связью рН, рассмотрим системы в неточной обобщенной гамильтоновой форме, т.е. считаем, что аффинная система управления, аффинная на выходе, может быть переписана как

$$\dot{x} = [J(x) - R(x)]\nabla H(x) + \Psi(x) + g(x)u, \quad y = C\nabla H(x),$$

где должны быть установлены свойства неструктурированной части динамики  $\Psi(x)$ , а также допущения и выбор конструкции для гамильтоновой функции  $H(x)$ .

#### 6. Порт-гамильтонова структура и физически осведомленные лагранжевы / гамильтоновы нейронные сети

Порт-гамильтониан – это хорошо изученный формализм (подробнее см. главу 1), который обобщает уравнения Гамильтона для учета диссипация энергии и внешнего управляющего воздействия на динамическую систему. Уравнения Гамильтона в рН-системе представлены в виде:

$$\begin{bmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \left( \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} + D(q) \right) \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ G(q) \end{bmatrix} u, \quad (7)$$

где  $D(q)$  – матрица демпфирования,  $u$  – входной сигнал временного управления,  $G(q)$  – нелинейное масштабирование вектора положения,  $I$  – единичная матрица, а  $0$  – нулевая матрица. Демпфирующая матрица является полуположительно определенной. Этот общий формализм легко сводится к стандартной гамильтоновой системе, когда  $D = 0$  и  $u = 0$ . Порт Гамильтониан использовался в приложениях управления, где известно явное знание управляющего члена  $u$ , и недавно было показано, что он дает многообещающие результаты в НС. Обратите внимание, что вектор  $[q, p, u]$  предоставляется в качестве входных данных для сети. Однако во многих приложениях управляющее усилие  $u$  неизвестно, и поэтому представляет интерес выявить лежащий в основе принудительный элемент из данных вектора состояния, где нет явных сведений о управляющем входе и демпфирующем элементе.

В то время как гамильтонова механика представляет собой один из способов решения проблемы обучающихся динамических систем, многочисленные недавние методы показывают, как включение других физически обоснованных индуктивных искажений в нейронные сети может улучшить обучение. Функциональные априори, например, встраивают полную функциональную форму уравнения в НСН. Нейронные сети, основанные на физике (ФИНС), и гамильтоновы сети – это два таких подхода, которые направлены на непосредственное встраивание уравнений движения в функцию потерь. В то время как ФИНС – это подходы, основанные на данных, которые полагаются на вычисление частных производных скрытого состояния, гамильтоновы сети – это независимые от данных подходы, которые предварительно определяют полную функциональную форму специфичного для системы гамильтониана в функции потерь.

Обсудим модели порт-гамильтоновых нейронных сетей (рН-ФИНС).

Начнем с иллюстрации того, как НС принимает форму порт-гамильтоновой формулировки уравнения (7.7) с двумя модификациями. Во-первых, этот подход использует тот факт, что многие демпфированные системы состоят из ненулевого, независимого от состояния члена демпфирования в нижнем правом квадранте, поэтому заменяем матрицу демпфирования  $D(q)$  матрицей, независимой от состояния, для которой только нижний правый член ненулевой и представлен  $N$ . Во-вторых, чтобы обобщить на зависящее от времени воздействие, мы заменим  $G(q)$  и силовым полем  $F(t)$ . Результирующее представление

$$\begin{bmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \left( \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & N \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ F(t) \end{bmatrix},$$

является достаточно общим для работы со многими хорошо известными возбуждаемыми внешним воздействием системами, но также достаточно специфичным для решения задач обучения в физических областях, имеющих практическое значение, таких как уравнение Дуффинга. Архитектура предлагаемой модели ФИНС и краткое описание сопоставимых существующих подходов показаны на рис. 21.

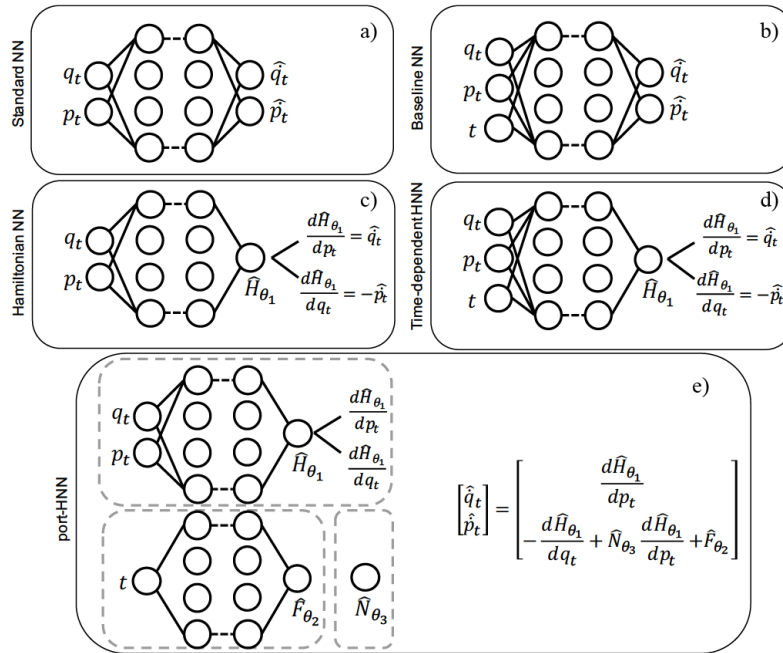


Рис. 21. Архитектуры, используемые для изучения динамических систем.

[Наивное расширение стандартной прямой связи НС (описанное в (а)) для включения времени в качестве дополнительной переменной показано в (b) и рассматривается как базовая сеть. Стандартный формат ГНС в (c) расширен для получения времени в качестве входных данных и продемонстрирован (d). Инновация представлена в (e), которая использует порт-гамильтонианы и явно изучает силу  $F_{\theta_2}$ , затухающий член  $N_{\theta_3}$  и гамильтониан  $H_{\theta_1}$  для предсказания производных состояния по времени]

Стандартный формат НС с прямой передачей на рис. 21 (а) и ГНС на рис. 21 (с) [16] принимают  $q$  и  $p$  в качестве входных данных и обучаются выдавать производные по времени от входных данных, при этом ГНС изучает промежуточный гамильтониан и использует обратное распространение для вычисления конечного результата. Естественным способом расширения этих архитектур для изменяющихся во времени неавтономных систем является включение времени в качестве дополнительного входного сигнала. Это приводит к появлению базовой НС (Base line NN), представленной на рис. 21 (b), и зависящей от времени ГНС (TDHNN – time dependent Hamiltonian NN), показанной на рис. 21 (d).

Хотя базовые значения НС и TDHNN включают время, они не предоставляют информации о лежащей в основе динамики системы. С другой стороны, формат рН НС способен извлекать и предоставлять информацию о стационарном гамильтониане, движущей силе и затухающем члене. Более того, рН НС неизменно превосходит все сетевые архитектуры, показанные на рис. 21 (a-d) во всех приложениях.

**Пример:** *Порт-гамильтонова формулировка механических систем.* Система рН с  $N$ -мерным многообразием пространства состояний  $\mathcal{X}$ , входным и выходным пространствами  $\mathcal{U}=\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^m$  и гамильтоновой функцией  $\mathcal{H}: \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  задается формулой

$$\dot{x} = \left[ J(x) - R(x) \right] \frac{\partial \mathcal{H}(x)}{\partial x} + g(x)u, \quad y = g^T \frac{\partial \mathcal{H}(x)}{\partial x} \quad (8)$$

где  $g(x)$  является  $N \times m$  матрицы,  $J(x) = -J^T(x)$  это  $N \times N$  соединения матрицы и  $R(x) = R^T(x)$  это  $N \times N$  положительный полуопределенные матрицы рассеяния. В конкретном случае механической системы в обобщенных координатах  $q$  о конфигурационном пространстве  $Q$  размерности  $n$  и скорости  $\dot{q} \in T_q Q$ , функция Гамильтона задается общей энергией  $\mathcal{H}(q, p) = \frac{1}{2} p^T M^{-1}(q) p + P(q)$ , где  $x = (q, p) \in T^*Q$  является состоянием,  $P(q)$  – это потенциальная энергия,  $p := M(q)$  импульс и инерционная матрица  $M(q)$  симметрична и положительно определена. Затем система рН из (7.8) принимает вид

$$\begin{bmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \left( \begin{bmatrix} 0_n & I_n \\ -I_n & -(E(q, p) + D(q, p)) \end{bmatrix} + D(q) \right) \begin{bmatrix} \frac{\partial P(q)}{\partial q} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0_n \\ B(q) \end{bmatrix} u, \quad (9)$$

$$y_n = \begin{bmatrix} 0_n & B^T(q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial P(q)}{\partial q} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p} \end{bmatrix},$$

где  $E(q, p) := S_H(q, p) - \frac{1}{2} \dot{M}(q)$ , и  $S_H(q, p) = S_L(q, \dot{q}) \Big|_{\dot{q}=M^{-1}(q)p}$  – кососимметричная матрица, чей  $(k, j)$ -й элемент равен  $S_{Lkj}(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\partial M_{ki}}{\partial q_j}(q) - \frac{\partial M_{ij}}{\partial q_k}(q) \right\} \dot{q}_i$ .

Из энергетического баланса вдоль траекторий (7.9) легко видеть, что силы  $E(q, p)M^{-1}(q)p$  не работают, т.е. их мощность равна нулю. Таким образом, система (9) сохраняет свойство пассивности карты  $u \rightarrow y = uE$ , а также функцию сохранения [16].

**Пример:** *классический осциллятор Дуффинга* задается уравнением Дуффинга, нелинейной динамической системой, которая включает как внешнее воздействие, так и демпфирование. Стационарный гамильтониан  $H_{\text{stat}}$  системы Дуффинга с принудительным и незатухающим действием задается формулой:  $\mathcal{H}_{\text{stat}} = \frac{p^2}{2m} + \alpha \frac{q^2}{2} + \beta \frac{q^4}{4}$ .

В отличие от простой системы «масса-пружина», уравнение Дуффинга имеет дополнительную квадратичную функцию  $q$ , которая делает систему негармоничной. Форма потенциальной функции может быть настроена как двойная или одиночная на основе коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta$ . Общее уравнение Дуффинга включает силу, изменяющуюся во времени, и член демпфирования, пропорциональный  $\partial H_{\text{stat}} / \partial q$ . Обычно нелинейное уравнение движения Дуффинга записывается в виде:

$$\ddot{q} + \delta \dot{q} + \alpha q + \beta q^3 = \gamma \sin(\omega t).$$

Различные комбинации параметров  $\alpha, \beta, \delta, \gamma, \omega$  делают систему Дуффинга либо хаотичной, либо нехаотической. Мы изучаем хаотичной режим. Уравнение Дуффинга раскрывает множество явлений, имеющих практическое значение, включая частотный гистерезис (например, в магнитах), упругость и теорию хаоса. Выбор параметров:  $\alpha = 1, \beta = 1, \delta = 0,1, \gamma = 0,39, \omega = 1,4$  приводит к хаотическому поведению в распределительной системе. Хаотические траектории очень чувствительны к начальным условиям, и, таким образом, гораздо труднее учиться на хаотической системе, чем на нехаотической.

*Обучение:* 20 начальных условий, отобранных равномерно в  $[-1, 1]^2$  каждое, выполняется в течение одного периода  $T = 2\pi/\omega$ , где  $\Delta t = T/\omega$  на 2000 точках обучения.

*Тестирование:* Система тестируется, оценивая, способна ли она визуально восстановить основное истинное сечение Пуанкаре начального условия, и фокусируем наше внимание на базовых значениях НС и ФИНС, поскольку они наиболее эффективны в нехаотическом режиме. Отображение Пуанкаре траектории измеряется путем определения значения силы и импульса через регулярные



промежутки времени, определяемые периодом слагаемого воздействия. Например, простая система «масса-пружина» будет генерировать единственную точку в фазовом пространстве при измерении через регулярные промежутки времени, в то время как хаотическая система генерирует более сложное отображение. Чтобы визуально оценить производительность сети с помощью отображения Пуанкаре, протестируем систему на одном начальном условии, не используемом в обучающем наборе, развернутом до  $T_{\max} = 18000$  с тем же значением  $\Delta t$ , что и на этапе обучения.

Чтобы интегрировать систему с таким большим  $T_{\max}$  для этого примера, работаем в предположении, что есть явное знание периода действия силы, и, как таковое, нормализуем временную переменную с учетом периода. Хотя предварительное знание  $\omega$  помогает обучению, оно используется только для извлечения отображения Пуанкаре. Это необходимо, поскольку модели явно не обучаются на временных шагах, превышающих  $2\pi/\omega$ . Результаты продемонстрированы на рис. 22.

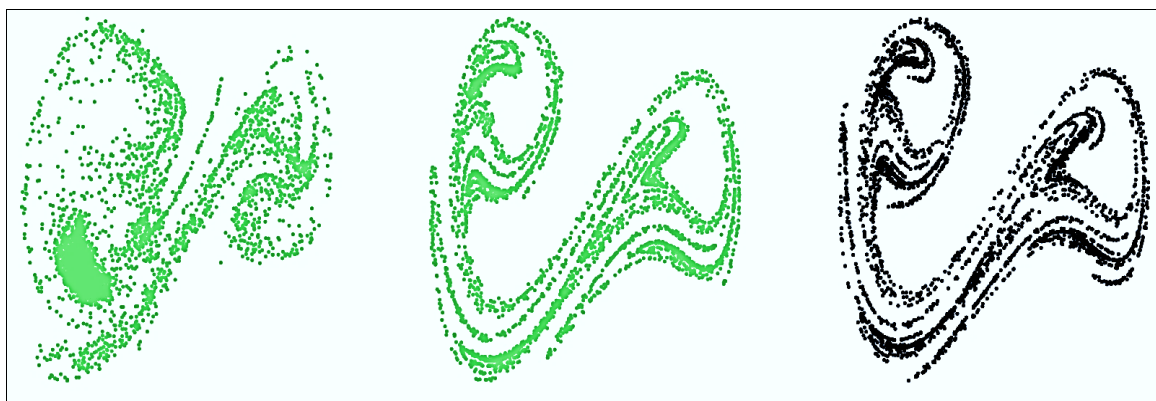


Рис. 22. Отображения Пуанкаре хаотического осциллятора Дуффинга

[Базовые значения НС (слева) и ФИНС (посередине) обучены для 20000 итераций с 2000 точками данных. Левое и среднее изображения показывают прогнозируемое отображение Пуанкаре для начального состояния, не используемого при оптимизации сетей. ФИНС значительно превосходит базовую НС при восстановлении основного истинного участка отображения Пуанкаре (справа)]

Визуальное сходство между участком, сгенерированным ФИНС, гораздо ближе к базовой НС и превосходит достовернее исходный уровень. Простая количественная мера этого сходства может быть вычислена с использованием  $MSE$  между графиками двумерной гистограммы. Результаты ФИНС равны 1,61, а базовой НС – 4,05. Результат показывает, что ФИНС действительно может быть использована для моделирования хаоса даже после обучения всего на нескольких точках данных хаотической траектории.

Пример. Исследуем движение управляемой релятивистской частицы в нелинейном потенциале двойной ямы, который математически представлен уравнением Дуффинга в релятивистской структуре. Рассматриваемый гамильтониан равен:  $\mathcal{H} = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} + \frac{\alpha}{2} q^2 + \frac{\beta}{4} q^4 - qy \sin(\omega t)$ , где  $c$  – скорость света, которая обычно устанавливается равной 1. Для простоты мы также устанавливаем массу покоя  $m_0 = 1$ , хотя структура, естественно, учитывает другие значения.

Обучение. Выборка обучения была на 25 начальных условиях, равномерно отобранных в  $[0, 2]^2$ . Рассматривались  $T_{\max} = 20,01$ ,  $\Delta t = 0,01$  и параметры  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 1$ ,  $\delta = 0$ ,  $\gamma = 0,2$ ,  $\omega = 1,2$ . Тестирование. Используя те же параметры, что и при обучении, мы реализуем 25 ненаблюдаемых начальных условий и представляем результаты на рис. 23.

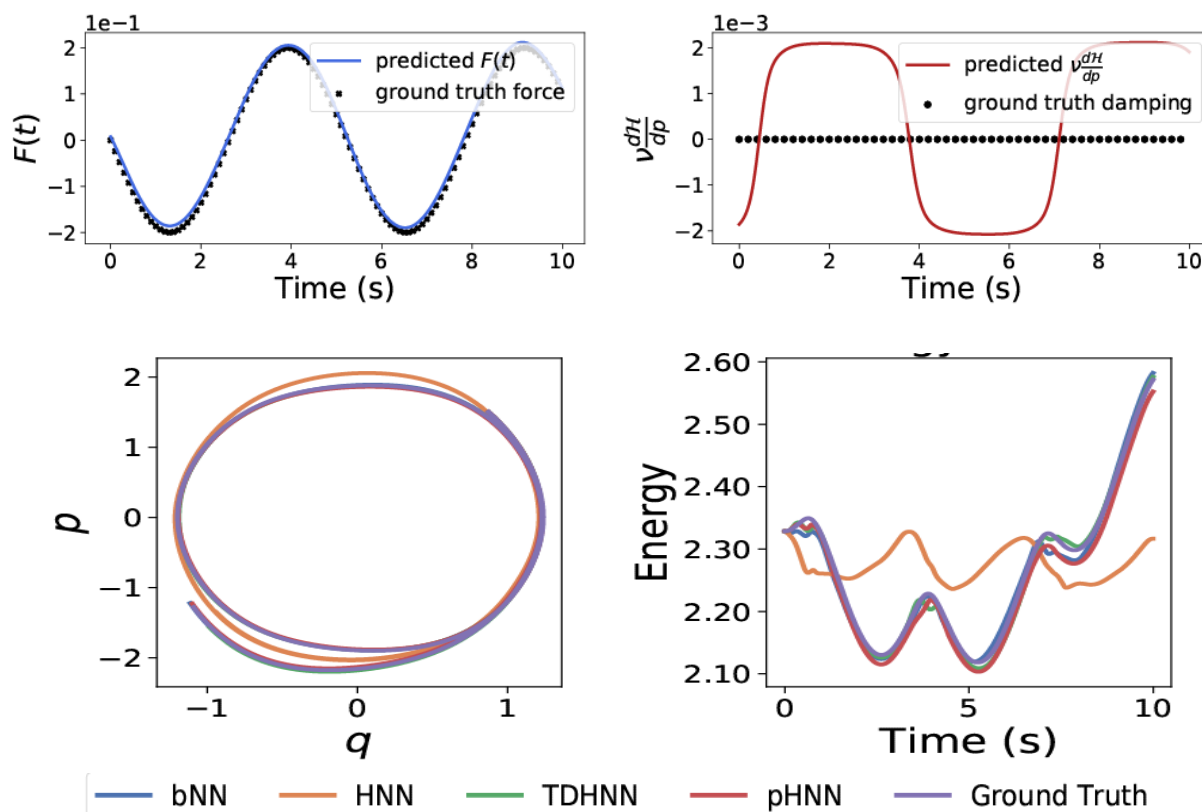


Рис. 23. Динамика релятивистской системы Дуффинга – условия силы и затухания рН НС (верхний ряд); фазовый портрет и энергетический спектр (нижний ряд)

Таким образом, рН НС способен восстанавливать лежащую в основе силу и превосходит другие архитектуры в генерировании временного состояния ранее неизвестных начальных условий. Этот эксперимент является доказательством того, что рН НС может обнаруживать динамику временных систем независимо от формы лежащего в их основе гамильтониана и неизменно превосходит другие архитектуры [17-20]. Таким образом, изучение динамики зависящих от времени неавтономных систем может быть достигнуто с помощью рН НС, универсальной НС, встроенной в формулировку порта-Гамильтона.

## Список источников

1. Machine learning and the physical sciences / G. Carleo [et al.]. – 2019. – URL: <https://arxiv.org/pdf/1903.10563.pdf>.
2. Physics-based Deep Learning / N. Thuerey et al. – 2022. – URL: <https://arxiv.org/pdf/2109.05237.pdf>.
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. – Vol. 378. – Pp. 686-707.
4. Physics-informed machine learning / G.E. Karniadakis [et al.] // NATURE REVIEWS. – 2021. – Vol. 3. – Pp. 423-440. – DOI: 10.1038/s42254-021-00314-5.
5. Angelov P.P. et al. Explainable artificial intelligence: an analytical review // WIREs Data Mining Knowledge Discovery. – 2021. – Vol. 3. – No 5. – DOI: 10.1002/widm.1424.
6. Scientific Machine Learning through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's next / S. Cuomo [et al.] – arXiv:2201.05624v3 [cs.LG] 13 Feb 2022.
7. Greydanus S., Dzamba M., Yosinski J. Hamiltonian neural networks. – 2019. – DOI: 10.48550/arXiv.1906.01563.

8. Sosanya A., Greydanus S. Dissipative Hamiltonian Neural Networks: Learning Dissipative and Conservative Dynamics Separately. – 2022. – URL: <https://arxiv.org/pdf/2201.10085.pdf>.
9. Somayajulu L.N., Che Y., Michael D., Shields Bayesian Inference with Latent Hamiltonian Neural Networks. – 2022. – DOI: 10.48550/arXiv.2208.06120.
10. Lagrangian neural networks / M. Cranmer [et al.]. – 2020. – DOI: 10.48550/arXiv.2003.04630.
11. Machine-Learning Non-Conservative Dynamics for New-Physics Detection / Z. Liu [et al.] // Physical Review E. – 2021. – Vol. 104. – Iss. 5. – P. 055302. – DOI: 10.1103/PhysRevE.104.055302.
12. When Physics Meets Machine Learning: A Survey of Physics-Informed Machine Learning / C. Meng [et al.] – 2022. – DOI: 10.48550/arXiv.2203.16797.
13. Zhao H., Sands T. Controlling Chaos in Van Der Pol Dynamics Using Signal-Encoded Deep Learning // Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (3). – Pp. 453. – DOI: 10.3390/math10030453.
14. Hamil P. Lagrangians and Hamiltonians. Cambridge University Press, UK. – 2014.
15. Основы применения квантовых сквозных ИТ в робототехнике и интеллектуальном когнитивном управлении: стохастическая механика, квантовая информационная физика и информационная геометрия / П. В. Зрелов, В. В. Кореньков, О. Ю. Тятюшкина, С. В. Ульянов // Системный анализ в науке и образовании: сетевое научное издание. – 2021. – № 2. – С. 83-117. – URL: <http://sanse.ru/download/439>.
16. Desai S., Roberts S. J. Port-Hamiltonian Neural Networks for Learning Explicit Time-Dependent Dynamical Systems // arXiv:2107.08024v1 [cs.LG] 16 Jul 2021.
17. Building healthy Lagrangian theories with machine learning / C. Valelis [et al.] // arXiv:2002.00049v3 [physics.comp-ph] 20 Jun 2021.
18. Bhattoo R., Ranu S., Krishnan N. M. A. Learning the Dynamics of Particle-based Systems with Lagrangian Graph Neural Networks // arXiv:2209.01476v1 [cs.LG] 3 Sep 2022.
19. Cueto E., Chinesta F. Thermodynamics of learning physical phenomena // arXiv:2207.12749v1 [cs.LG] 26 Jul 2022.
20. 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. – No 2. – С. 310-325. – DOI: 10.25559/SITITO.18.202202.310-32.

### ***Приложение. Взаимосвязь корпускулярной (Лагранжа) и волновой (Гамильтона) моделей аналитической механики***

В механике сплошных сред различают лагранжев и эйлеров подходы описания сред [14]. При лагранжевом подходе к описанию среды следят за движением каждой частицы среды. Причем координаты 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 [15,20].

*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

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

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

$$m \frac{dv}{dt} + \nabla U(x, t) = 0, \quad (\text{П1})$$

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

$$\frac{dv(x, t)}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} v(x, t) + v(x, t) \nabla v(x, t). \quad (\text{П2})$$

Таким образом, полная производная состоит из двух переменных слагаемых: первое слагаемое характеризует изменение функции  $v(x, t)$  в данном месте пространства; второе слагаемое характеризует изменение функции  $v(x, t)$ , происходящее благодаря тому, что рассматриваемая частица переносится в пространстве из одной точки в другую. Второе слагаемое  $v(x, t) \nabla v(x, t)$  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 [14]. Из векторного анализа известно также следующее соотношение:

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

Тогда из (П2) и (П3) следует

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

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

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

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

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

Подставляя (П6) в (П5), получаем равенство

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

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

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

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

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:  $m\frac{dv}{dt} + \nabla U + \alpha v = 0$ .

Применяя изложенную методику к данному уравнению, получим

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

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 [15]. 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  $v(x,t) = \frac{1}{m}\nabla S(x,t)$ , 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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} S(x,t) + \frac{1}{2m} [\nabla S(x,t)]^2 + \frac{\alpha}{m} S(x,t) + U(x,t) = 0 \quad (\text{П10})$$

Уравнение (П10) является уравнением Гамильтона-Якоби с диссипацией [15].