

Modeliranje dinamike fizikalnih sustava naprednim metodama dubokog učenja

Filip Mirković

Mentor: izv. prof. dr. sc. Davor Horvatić

Prirodoslovno matematički fakultet, Fizički odjek
Bijenička cesta 28, 10000 Zagreb



Dinamički sustavi i opis problema

Definicija

Dinamički sustav je uređena trojka prostora stanja \mathcal{S} , vremenskim skupom \mathcal{T} i funkcije

$$\mathcal{F} : \mathcal{S} \times \mathcal{T} \longrightarrow \mathcal{S} \quad (1)$$

- Dinamički sustav je kontinuran ako vrijedi: $\mathcal{T} \subseteq \mathbb{R}$
- U tom slučaju \mathcal{F} je obična ili parcijalna diferencijalna jednadžba

Evolucija stanja $\phi \in \mathcal{S}$ dana je

$$\partial_t \phi = \mathcal{F}_\eta(x, \phi, \nabla_x \phi, \nabla_x^2 \phi, \phi \nabla_x \phi, \dots) \quad (2)$$

- η je vektor parametara jednadžbe. Npr. ω u harmoničkom oscilatoru.

Opis problema

Želimo:

Za svaki $\phi_0 \in \mathcal{S}$ poznavati buduće ϕ_t za proizvoljno velike t .

Priječi nas:

1. \mathcal{F} je nelinearna
2. Dinamika je kaotična
3. \mathcal{S} je visokodimenzionalan
4. x je visokodimenzionalan
5. \mathcal{F} je djelomično ili potpuno nepoznat
6. Sve od navedenog

Sretni smo ako:

Za veliki broj ϕ_0 uspijevamo precizno procijeniti ϕ_t do nekog konačnog $T \in \mathcal{T}$.

Iznos T određen je pojedinim problemom.

Tipična rješenja

Konstrukcija minimalnog modela

- Rješenje nije skupo
- Temelji se na teoriji, iskustvu i podatcima
- Model opisuje samo općenite značajke dinamike
- Numerika je i dalje potrebna

Numeričko rješavanje diferencijalnih jednadžbi

- Dinamika treba biti potpuno poznata
- Proces je skup
- Visoka dimenzionalnost prostora postaje velika prepeka

Modeliranje iz podataka

Nije potrebno poznavati dinamiku

Često je potrebno puno podataka

Transformerski model i mehanizam pozornosti

Uvod

- Originalno nastali 2017. u području obrade prirodnog jezika (NLP) [14]
- Pokazali se izuzetno uspješnim, npr. GPT3 chatbot je transformer
- Brzo se šire na ostala prodruga strojnog učenja, npr. računalni vid

Od prevođenja teksta do modeliranja dinamike

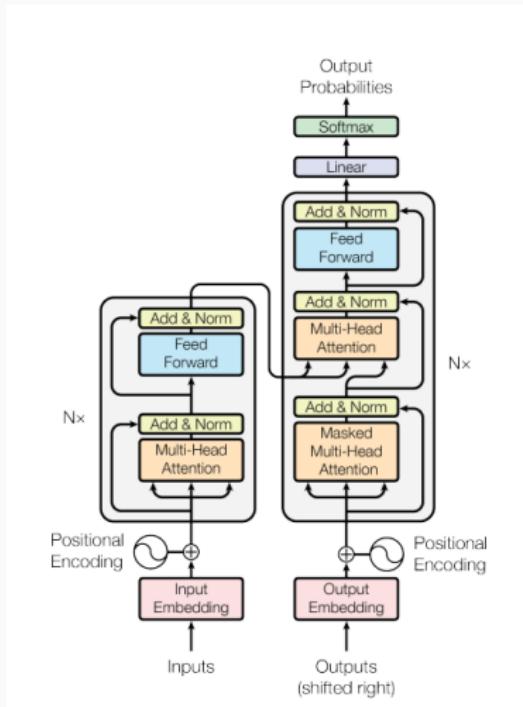
- U obradi prirodnog jezika riječi se često reprezentiraju vektorima
- Uz vektorske reprezentacije prevođenje teksta postaje nastavljanje niza vektora
- U računalima dinamika fizikalnih sustava je diskrtizirana i u formi niza vekora

Transformerski model - arhitektura

- Koder-Dekoder struktura
- Koder lijevo, dekoder desno
- U modeliranju dinamike koristimo samo dekoder

Pozornost

Ključna komponenta transformera je višestruka pozornost (eng. Multi-Head Attention)



Slika 1: Arhitektura originalnog transformera. Preuzeto is [14].

Motivacija

Neka je $\{\xi_1, \dots, \xi_n\}$ n opaženi niz vektora stanja koji predstavlja evoluciju sustava kroz vrijeme.

- Ako je dinamika poznata (i možemo baratati jednadžbama), jedina informacija koju trebamo za nastavak vremenskog niza je ξ_n
- Ako ne poznamo dinamiku korisno je modelu dati informaciju o c prethodnih stanja
- Time dobivamo kontekstni interval $\mathcal{C} = \{\xi_{n-c}, \dots, \xi_n\}$
- Iz konekstnog intervala konstruiramo kontekstni vektor \mathbf{c} kojeg pružamo modelu kao dodatnu informaciju o protekloj evoluciji

Ideja: Kontekstni vektor \mathbf{c} sadrži informaciju o dalekosežnim vremenskim ovisnostima.

Pojednostavljena pozornost - recept:

1.) Računamo sličnost između ξ_n i svih vektora $\xi_l \in \mathcal{C} \subset \mathbb{R}^d$. Mjera sličnosti je *normirani* skalarni produkt

$$s_l = \frac{\xi_n \cdot \xi_l}{\sqrt{d}} \quad (3)$$

2.) Iz sličnosti dobivamo koeficijente pozornosti

$$\alpha_l = \text{softmax}(s)_l = \frac{e^{s_l}}{\sum_{i=1}^c e^{s_i}} \quad (4)$$

3.) Kontekstni vektor je

$$c = \sum_{l=1}^c \alpha_l \xi_l \quad (5)$$

Ostatku modela se pružaju informacije o ξ_n i c za stvaranje predikcije o ξ_{n+1} .

Mehanizam pozornosti [3] - Potpuna pozornost

Unapređenja pojednostavljene pozornosti:

Uvodimo tri neuronske mreže \mathcal{F}_v , \mathcal{F}_q , \mathcal{F}_k takve da

$$\mathcal{F}_v(\xi_i) = v_i \in \mathbb{R}^d \quad (6)$$

$$\mathcal{F}_q(\xi_i) = q_i \in \mathbb{R}^{d_k} \quad (7)$$

$$\mathcal{F}_k(\xi_i) = k_i \in \mathbb{R}^{d_k} \quad (8)$$

Veličine v , k , q zovemo vrijednost, ključ i upit. Računamo ih za svaki $\xi \in \mathcal{C}$.

Ostatku modela pružaju se informacije o v_n i c za stvaranje predikcije o ξ_{n+1} .

Potpuna pozornost - recept:

1.) Sličnosti računamo između svih ključeva i zadnjeg upita q_n .

$$s_l = \frac{q_n \cdot k_l}{\sqrt{d_k}} \quad (9)$$

2.) Koeficijente pozornosti računamo na isti način

$$\alpha_l = \text{softmax}(s)_l = \frac{e^{s_l}}{\sum_{i=1}^c e^{s_i}} \quad (10)$$

3.) Kontekstni vektor računamo u prostoru vrijednosti

$$c = \sum_{i=1}^c \alpha_i v_i \quad (11)$$

Zašto uvodimo \mathcal{F}_v , \mathcal{F}_k i \mathcal{F}_q ?

- Dodavanjem mreža povećavamo ekspresivnost modela.
- Želja nam je da mreže nauče bitne značajke stanja ξ .
- Značajke su reprezentirane vektorima q , k i v .
- Bez korištenja \mathcal{F}_v , \mathcal{F}_k i \mathcal{F}_q , sličnost pridodaje svim komponentama ξ jednaku važnost.

Primjer:

Promotrimo gibanje točkaste čestice u potencijalu 2-D harmoničkog oscilatora

$$V(x, y) = ax^2 + \epsilon y^2$$

Neka je $\epsilon \ll a$ te vektor stanja $\xi = (x, y, \dot{x}, \dot{y})$.

Kada bismo računali mjere sličnosti između dvaju vektora, običan skalarni produkt pridodaje jednaku važnost koordinatama x i y .

Zbog manje krutosti potencijala u y smjeru y koordinata je većeg raspona, međutim dinamika je osjetljivija na perturbacije u x i \dot{x} .

Primjerice, uvođenjem linearnih operatora $\mathcal{F}_v = \mathbb{1}$, $\mathcal{F}_q = \mathcal{F}_k = [w_{ij}]$, gdje su $w_{xx} > w_{yy}$ te $w_{i,j} = 0$ za $i \neq j$ zaobilazimo ovaj problem.

Mehanizam pozornosti [6] - Paralelizacija

Najskuplja komponenta izrade dubokog modela je **treniranje**

Paralelizacija

Tijekom treniranja računamo v , q i k za svaki $\xi \in \mathcal{C}$ te iz njih radimo matrice V , Q i K koje imaju c redova, jedan za svaki vektor iz \mathcal{C} .

Sličnosti tada možemo izraziti matričnim množenjem koje se efikasno izvršava na grafičkim karticama.

$$S = \frac{QK^T}{\sqrt{d_k}} \quad (12)$$

Analogno dobivamo matricu pozornosti:

$$A = \text{softmax}(S) \quad (13)$$

Normalizacija u softmax se provodi po stupcima matrice S .

Problem:

- Za neki vektor $\xi_i \in \mathcal{C}$ izračunat ćemo koeficijente pozornosti za sve preostale ξ_j uključujući i buduće $\xi_j, j > i$.
- Ako računamo stanje ξ_n zadnji vektor na kojeg model smije obratiti pozornost je ξ_{n-1} .

Rješenje: Maskiranje

- Sve elemente iznad glavne dijagonale matrice S postavimo na $-\infty$ (u praksi koristimo jako negativan broj)
- Time je koeficijent pozornosti 0 za te elemente.

Problem

- Tijekom treniranje model obrađuje sve vektore iz \mathcal{C} istovremeno
- Postojeći vremenski uređaj ovime je narušen

Kodiranje vremenskog uređaja

- Neka je ξ_{posi} i -ta komponenta vekotra na poziciji pos u kontekstnom intervalu.
- Toj komponenti dodajemo vrijednost PE_{posi}

$$PE_{posi} = \begin{cases} \sin(pos/10000^{\frac{i}{d}}) & \text{i je paran} \\ \cos(pos/10000^{\frac{i}{d}}) & \text{i je neparan} \end{cases} \quad (14)$$

Funkcija gubitka transformera

Neka je $\{(\mathcal{C}_i, \tilde{\mathcal{C}}_i) \quad i = 1 \dots D\} = \mathcal{D}$ skup podataka. S time da je $\mathcal{C}_i = \{\xi_j \mid j = n \dots n + c\}$ ulazni kontekstni interval, a $\tilde{\mathcal{C}}_i = \{\xi_j \mid j = n + 1 \dots n + c + 1\}$ konekstni interval kojeg model treba predvidjeti iz \mathcal{C}_i .

Funkcija gubita je

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^D \sum_{j=1}^c \|\xi_j^i - \hat{\xi}_j^i\|_2^2 \quad \xi_j^i \in \tilde{\mathcal{C}}_i \quad (15)$$

Simbol $\hat{\xi}$ označava sanja koja predviđa model.

Vektorske reprezentacije

Učenje vektorskih reprezentacija sustava [1]

Koji sustavi nisu opisani vektorom?

- Sve što je dosada objašnjeno funkcioniра ako je stanje sustava ϕ reprezentirano vektorom ξ .
- Bitna klasa dinamički sustava koji nisu vektori su polja, npr. brzina strujanja fluida, elektromagnetsko polje, valne funkcije...

Naivan pristup

Recimo da je $\phi^t(x, y)$ dvodimenzionalno skalarno polje, npr. iznos brzine toka fluida.

U računalu polje je spremljeno u obliku matrice ϕ_{ij}^t , gde $i = 1 \dots N$, $j = 1 \dots M$.

Naivno možemo reprezentirati ϕ_{ij}^t vektorom tako da matricu razvučemo po jednoj dimenziji, recimo po stupcima.

Dobivamo vektor $\vec{\phi}_n^t$, $n = 1 \dots N \cdot M$, međutim komponente originalne matrice ϕ_{ij}^t i ϕ_{ij+1}^t su u vektoru $\vec{\phi}^t$ udaljene za N redova.

Narušena lokalnost

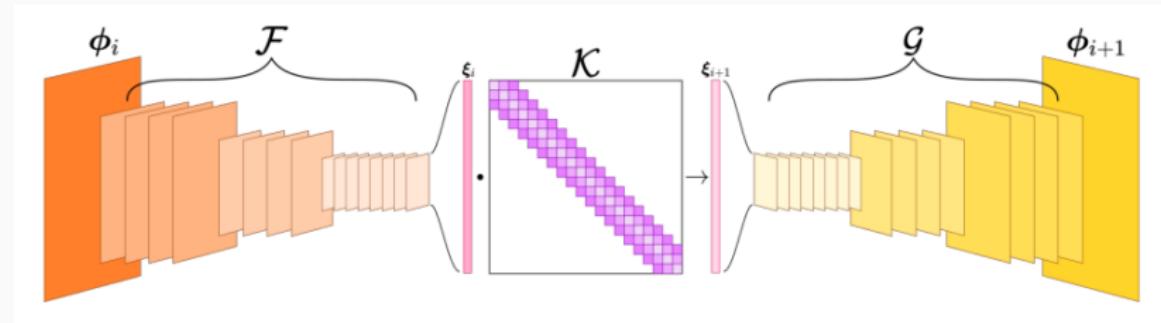
Budći da je evolucija sustava opisana parcijalnom diferencijalnom jednadžbom, na evoluciju ϕ_{ij}^t utječe stanja poput $\phi^{tij} + 1$ i $\phi^{ti} + 1, j$.

U vektoru $\vec{\phi}^t$ ta su stanja jako *daleko* jedna od drugog.

Dinamika na mnogostruktosti

- Osim narušene lokalnosti problem s naivnom vektorskog reprezentacijom jest što je vektorski prostor koji sadrži $\vec{\phi}$ prevelik.
- Skup svih matrica tipa $N \times M$ sadrži puno više od rješenja Navier-Stokesovih jednadžbi koje opisuju tok fluida, npr. Matrica kojoj su komponente slučajni brojevi isto je sadržana u $\mathbb{R}^{N \times M}$.
- Dinamika danog sustava odvija se na nekoj mnogostruktosti, a ne čitavom $\mathbb{R}^{N \times M}$.

⇒ Uvodimo neuronske mreže kojima učimo prikladnu vektorskog reprezentaciju sustava iz podataka.



Slika 2: Koder-Koopman-Dekoder struktura. Preuzeto iz [5].

Koder-Koopman-Dekoder struktura (DKD)

1. Koder \mathcal{F} preslikava stanje sustava $\phi \in \mathcal{S}$ u prikladnu vektorskiju reprezentaciju $\xi \in \Xi$
2. Dekoder \mathcal{G} rekonstruira stanje sustava ϕ iz reprezentacije ξ . On je inverz kodera.
3. Koopmanov \mathcal{K} operator uređuje prostor reprezentacija.

Koder

Za generiranje vektorskih reprezentacija koristimo neuronsku mrežu $\mathcal{F} : \mathcal{S} \longrightarrow \Xi$.

Čest izbor slojeva kodera su konvolucijski slojevi. Konvolucijski slojevi uče lokalne značajke stanja ϕ [2] [7].

Dekoder

Nakon što obavimo predikcije nad vektorima iz Ξ želimo od njih ponovno rekonstruirati stanja sustava.

Za to koristimo dekoder $\mathcal{G} : \Xi \longrightarrow \mathcal{S}$.

Kada je to moguće, arhitektura dekodera je zrcalna arhitekturi kodera.

Problem

- Ništa ne prijeći sustav kodera i dekodera da nasumično ne razbacaju $\mathcal{F}(\phi)$ po Ξ
- Želimo da originalna dinaimka bude na neki način prisutna u Ξ
- Problem zaobilazimo tako da stanja ϕ^t i $\phi^{t+\Delta t}$ preslikamo u bliska stanja ξ^t i $\xi^{t+\Delta t}$, s obzirnom na euklidsku normu.

Koopamnov operator

Stanja ϕ možemo preslikati u beskonačno dimenzionalni vektorski prostor u kojem sukcesivna stanja generiramo grupnim translacijama [10].

$$\xi(t) = e^{Ht} \xi(t_0) \quad (16)$$

Operator \mathcal{K} zocemo Koopmanovim operatorom. Detalji teorije Koopmanovog operatora su u [3], [8], [1].

Operator translacija u vremenu razvijamo do linearog člana

$$\xi(t_0 + \Delta t) = (1 + H\Delta t)\xi(t_0) = \mathcal{K}\xi(t_0) \quad (17)$$

Operator \mathcal{K} zovemo Koopmanov operator. Pretpostavljamo ga u obliku jedinične matrice koja ima korekcije reda $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Služi za strukturiranje latentnog prostora Ξ .

Funkcija gubitka

Funkciju gubitka \mathcal{L}_{DKD} dijelimo na tri dijela: $\mathcal{L}_{DKD} = \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_D + \lambda \mathcal{L}_{reg}$

1. Rekonstrukcijski gubitak

$$\mathcal{L}_R = \sum_{i=1}^D \sum_{j=0}^T \text{MSE}(\phi_j^i, \mathcal{G} \circ \mathcal{F}(\phi_j^i)) \quad (18)$$

Osigurava da su \mathcal{F} i \mathcal{G} aproksimativno inverzni.

2 . Dinamički gubitak

$$\mathcal{L}_D = \sum_{i=1}^D \sum_{j=1}^T \text{MSE}(\phi_j^i, \mathcal{G} \circ \mathcal{K}^j \mathcal{F}(\phi_0^i)) \quad (19)$$

Osigurava da Koopmanov operator generira sukcesivna stanja, odnosno uređuje prostor Ξ .

Regularizacijski gubitak

$$\mathcal{L}_{reg} = \|\mathcal{K}\|_2^2 \quad (20)$$

Regularizira oblik Koopanovog operatora [9].

Gissingerov sustav

Gissingerov sustav [1] - Jednadžbe gibanja

Gissingerov sustav

- Uveden kao minimalna aproksimacija magneto-hidrodinamičkih jednadžbi [6].
- Stanje sustava je opisano trima modovima: dipolnim D , kvadrupolnim Q i brzinskim V .
- Namjenjen da opiše obrtaje polova Zemljiniog magnetskog polja - prejednostavan.

Jednadžbe gibanja

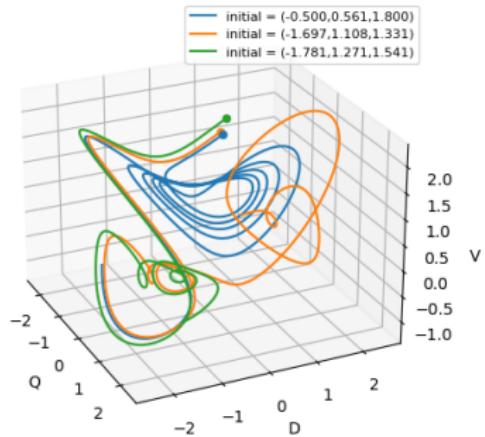
$$\dot{Q} = \mu Q - VD \quad (21)$$

$$\dot{D} = -\nu D + VQ \quad (22)$$

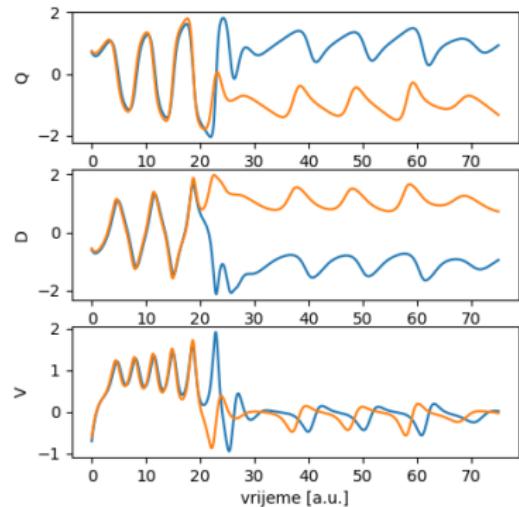
$$\dot{V} = \Gamma - V + DQ \quad (23)$$

Posjeduje bogatu dinamiku koja postaje kaotična za određene parametre μ , ν , Γ . Sustav je analiziran u kaotičnom režimu za $\mu = 0.119$, $\nu = 0.1$, $\Gamma = 0.9$

Gissingerov sustav [2] - Primjer kaosa



Slika 3: Bogata dinamika Gissingerovog sustava. Narandžasta krivulja doživljava jedan kaotičan obrtaj dipolnog moda D .



Slika 4: Dvije krivulje počinju iz jako bliskih početnih uvijeta te naglo divergiraju jedna od druge.

Gissingerov sustav [3] - Lyapunovljev eksponent

Lyapunovljev eksponent

- Daje mjeru brzine divergencije bliskih trajektorija
- Za kaotične atraktore brzina divergencije je eksponencijalna
- Koristimo ga za ocjenu kvalitete modela

Razvojem u red dobivamo jednadžbu za evoluciju smetnje $\delta \mathbf{x}$

$$\dot{\delta x}_\mu = \sum_\nu \partial_\nu f_\mu(\mathbf{x}) \delta x_\nu \quad (24)$$

Jakobijan $[\partial_\nu f_\mu]$ izračunat je duž nesmetane trajektorije.

Kratak izvod

Neka je stanje sustava definirano varijablama x_μ , a njihova evolucija

$$\dot{x}_\mu = f_\mu(\mathbf{x})$$

Tajektoriji \mathbf{x} dodajemo infinitezimalu smetnju $\delta \mathbf{x}$.

$$\dot{x}_\mu + \dot{\delta x}_\mu = f_\mu(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x})$$

Gissingerov sustav [4] - Lyapunovljevo vrijeme

Integriramo li jednadžbu (24) divergenciju trajektorija ocjenujemo veličinom

$$d(t) = \sqrt{\sum_{\nu} \delta x_{\nu}(t)^2}$$

Lyapunovljev eksponent definiramo

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{d(0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \log \left(\frac{d(t)}{d(0)} \right)$$

Lyapunovljevo vrijeme definirano je kao inverz Lyapunovljeva eksponenta i daje vremensku skalu na kojoj sustav postaje kaotičan [13] [12]. Za Gissingerov sustav smo Lyapunovljevo vrijeme procijenili numerički postupkom definiranim u [11].

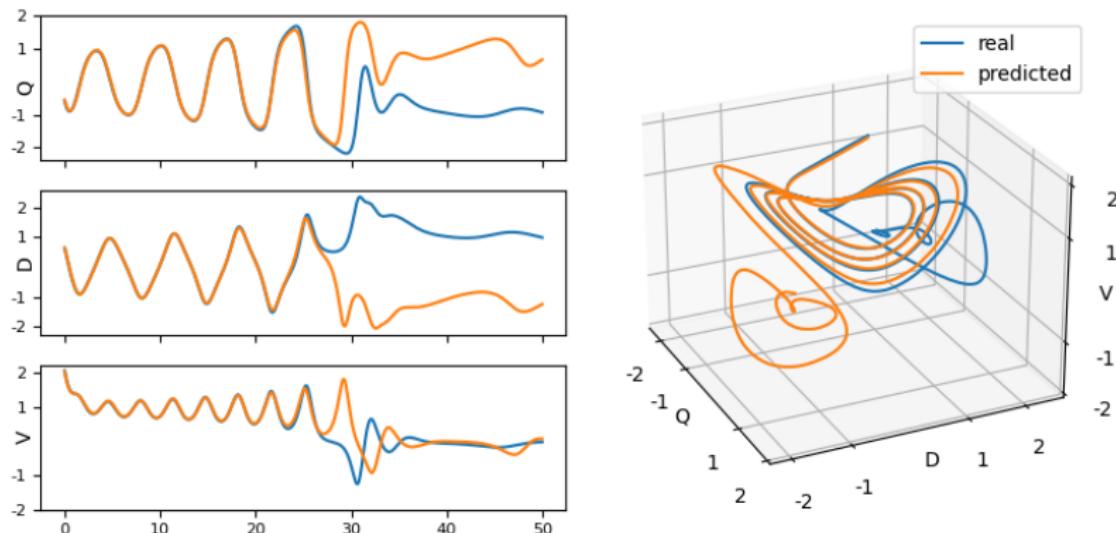
$$\tau_L = 13.4$$

Rezultati

Rezultati

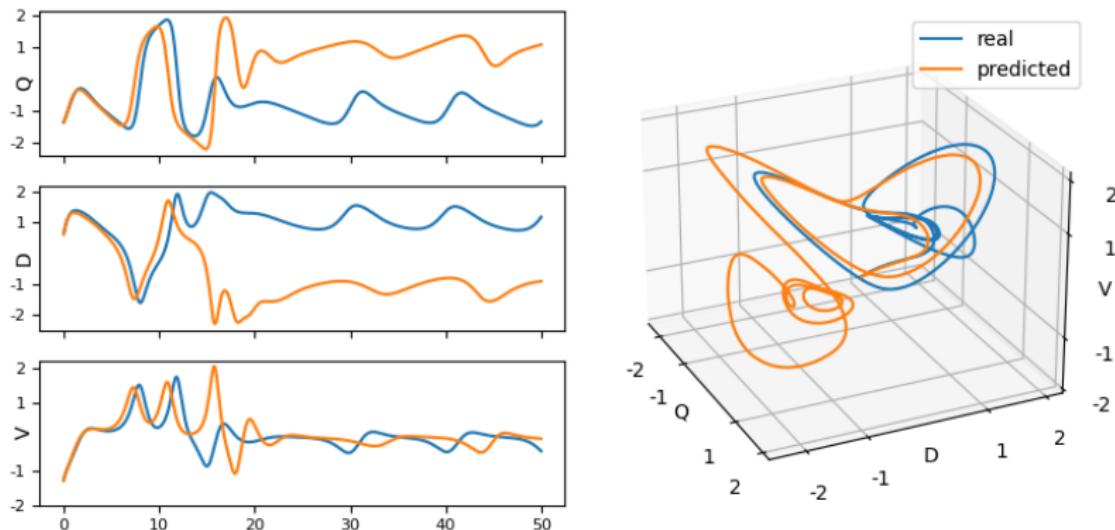
- Transformer uspjeva naučiti općenite karakteristike faznog prostora čime sam postaje kaotičan [4].
- Model smatramo uspješnim, ako daje precizne predikcije barem dva Lyapunovljeva vremena.
- Predikcije se za većinu početnih uvjeta poklapaju sa stvarnim rješenjima na vremenskoj skali dva Lyapunovljeva vremena.
- Postoje regije u na atraktoru gdje je model izrazito uspješan ili izrazito neuspješan.
- Na kraju kaos uvijek prevlada.

Rezulati [2] - Tipična uspješnost



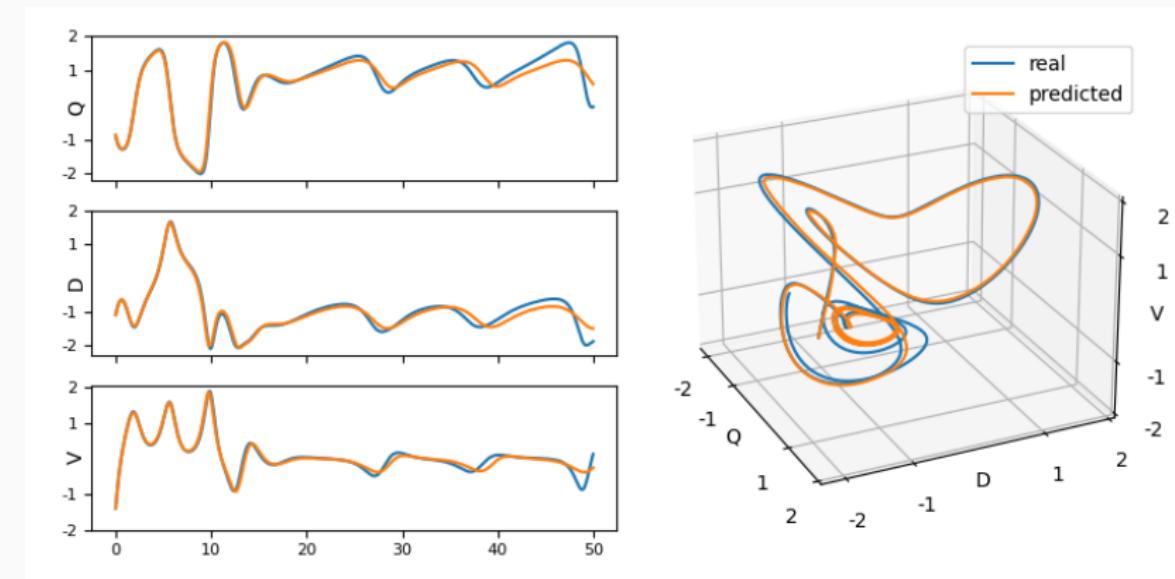
Slika 5: Predikcija modela i stvarna dinamika sustava prate se na skali dva Lyapunovljeva vremena. Model zadržava ovaku preciznost za većinu početnih uvjeta na atraktoru.

Rezulati [3] - Niska uspješnost



Slika 6: Postoje i nazigled nasumične točke u kojima model gubi preciznost iznimno brzo $\sim 0.5\tau_L$.

Rezulati [4] - Velika uspješnost



Slika 7: Iznimno dugotrajna preciznost modela $\sim 3\tau_L$.

Zaključak i diskusija

Prednosti modela

- Arhitekutra trasformera pokazuje se uspješnom u modeliranju dinamike fizikalnih sustava.
- Može se koristiti u situacijama kada sve dinamičke varijable nisu poznate ili osmotrive.

Mane modela

- Potrebne su velike količine podataka o fenomenu.
- Kaos uvijek prevlada i predikcije postanu neprecizne.
- Loša interpretabilnost

Unaprjeđenja modela

- Treniranje DKD sustava uz transformer (eng. finetuning)
- Bolje kodiranje vremenskog uređaja
- Ugrađivanje fizikalnih spoznaja o problemu

Hvala na pažnji!
Pitanja?

-  Petar Bevanda, Stefan Sosnowski, and Sandra Hirche.
Koopman operator dynamical models: Learning, analysis and control.
Annual Reviews in Control, 52:197–212, 2021.
-  Michael M. Bronstein, Joan Bruna, Taco Cohen, and Petar Veličković.
Geometric deep learning: Grids, groups, graphs, geodesics, and gauges, 2021.
-  Akshunna S. Dogra and William T Redman.
Optimizing neural networks via koopman operator theory.
2020.
-  Jaime Lopez Garcia and Angel Rivero Jimenez.
Phase space learning with neural networks, 2020.

Literatura ii

-  Nicholas Geneva and Nicholas Zabaras.
Transformers for modeling physical systems.
Neural Networks, 146:272–289, feb 2022.
-  C. Gissinger.
A new deterministic model for chaotic reversals.
The European Physical Journal B, 85(4), apr 2012.
-  Ian J. Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville.
***Deep Learning*.**
MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2016.
<http://www.deeplearningbook.org>.
-  Di Luo, Jiayu Shen, Rumen Dangovski, and Marin Soljačić.
Koopman operator learning for accelerating quantum optimization and machine learning, 2022.

Literatura iii

-  Pankaj Mehta, Marin Bukov, Ching-Hao Wang, Alexandre G.R. Day, Clint Richardson, Charles K. Fisher, and David J. Schwab.
A high-bias, low-variance introduction to machine learning for physicists.
Physics Reports, 810:1–124, may 2019.
-  Igor Mezic.
Koopman operator, geometry, and learning, 2020.
-  Thomas S. Parker and Leon O. Chua.
Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems.
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989.
-  Steven H. Strogatz.
Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering.
Westview Press, 2000.

Literatura iv

-  Michael Tabor.
Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics-An Introduction.
Wiley, 1989.
-  Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit,
Llion Jones, Aidan N Gomez, Łukasz Kaiser, and Illia Polosukhin.
Attention is all you need.
In I. Guyon, U. Von Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus,
S. Vishwanathan, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural
Information Processing Systems*, volume 30. Curran Associates,
Inc., 2017.