DOI: 10.18411/vntr2024-175-1

УДК 004.032.26

ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФОВЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ЗАДАЧЕ АППРОКСИМАЦИИ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ФЕРМИ-ПАСТА-УЛАМА

© Данил Валерьевич Давыдов, Алексей Олегович Мальханов
Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова–Грехова Российской академии наук», Нижний Новгород, Россия
davidoffdan27@yandex.ru, alexey.malkhanov@gmail.com

Аннотация. *В данной работе исследуется применимость графовых нейронных сетей к задачам аппроксимации решения проблемы Ферми-Паста-Улама (ФПУ). Основное внимание уделено методам восстановления энергии мод колебаний с помощью графовых нейронных сетей и её сравнению с энергией, вычисленной с помощью традиционных численных методов.*
Ключевые слова: *проблема Ферми-Паста-Улама, графовые нейронные сети, глубокое обучение.*

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Грант РНФ № 20-19-00613).

APPLICATION OF GRAPH NEURAL NETWORKS TO APPROXIMATE THE SOLUTION OF THE FERMI-PASTA-ULAM PROBLEM

© D.V. Davydov, A.O. Malkhanov
Mechanical Engineering Research Institute of the RAS – Branch of "Federal Research Center A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences", Nizhny Novgorod, Russian Federation
davidoffdan27@yandex.ru, alexey.malkhanov@gmail.com

Abstract. *In the paper, there is investigated the applicability of graph neural networks to the problems of approximating the solution of the Fermi-Pasta-Ulam (FPU) problem. The main attention is paid to the methods of reconstructing the energy of oscillation modes with the help of graph neural networks and its comparison with the energy calculated with traditional numerical methods.*
Keywords: *Fermi-Pasta-Ulam problem, graph neural networks, deep learning.*

Acknowledgements. *The work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 20-19-00613).*

Введение. Возникновение направления в машинном обучении, посвященном решению научных задач, открыло новую область в методах моделирования физических проблем на стыке аналитической постановки задачи и моделирования на основе данных. В последние годы широкое распространение получили физико-информированные нейронные сети (PINN) [1, 2], различные нейронные операторы, наиболее известный среди них оператор Фурье (FNO) [3], а также разнообразные графовые нейронные сети (GNN) [4]. Все эти алгоритмы способны работать с относительно небольшим объемом данных, что выгодно отличает их от других методов анализа.

В данной работе исследуется применимость графовых нейронных сетей к задачам аппроксимации решения проблемы Ферми-Паста-Улама (ФПУ) [5]. Работа посвящена методам восстановления энергии мод колебаний с помощью графовых нейронных сетей и её сравнение с энергией, полученной с помощью традиционных численных методов.

О проблеме (парадоксе) Ферми-Паста-Улама. В 1953 году сотрудники национальной лаборатории в Лос-Аламосе обратили внимание на простейшую, первый взгляд, одномерную систему – цепочку грузиков, соединенных пружинами с нелинейной упругостью. Результаты моделирования, с одной стороны, были вполне ожидаемыми: после возбуждения основного колебательного режима систему предоставляли самой себе, после чего энергия равномерно распределялась по остальным колебательным модам, и движения цепочки обретали характер белого шума. Но запустив моделирование системы в очередной раз, исследователи получили неожиданный результат – система вышла из состояния равновесия, энергия в процессе эволюции периодично переходила между наиболее длинноволновыми модами, практически не передаваясь на коротковолновые колебания, более того система возвратилась в исходное состояние. Система уравнений, описывающая динамику такой модели, имеет вид:

$$\ddot{y}_n = y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n + \alpha[(y_{n+1} - y_n)^2 - (y_n - y_{n-1})^2] + \beta[(y_{n+1} - y_n)^3 - (y_n - y_{n-1})^3] \quad (1)$$

где y_n – смещение $n-$го грузика, α, β – параметры нелинейности (нелинейной упругости). Замена переменных

$$y_n(t) = \sqrt{\frac{2}{N+2}} \sum_{k=1}^{N} Q_k(t) \sin\left(\frac{\pi k n}{N+1}\right), \quad (2)$$

приводит к N новым переменным $Q_k(t)$, являющимся нормальными модами линейной системы. Частоты нормальных мод:

$$\omega_k = 2 \sin \frac{\pi k}{2(N+1)}. \quad (3)$$

$$E_k = \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2\right). \quad (4)$$

В отсутствии нелинейности энергия (4) каждого из -осцилляторов является интегралом движения. В слабо нелинейном случае эти моды взаимодействуют между собой и их энергии E_k начинают завесить от времени.
Гамильтониан цепочки нелинейных осцилляторов имеет вид:

$$H = \sum_{i=0}^{N} (\frac{1}{2} p_i^2 + V(y_{i+1} - y_i)), \quad (5)$$

где y_i и p_i – смещение и импульс $i-$ го грузика, $V(y) = \frac{y^2}{2} + \frac{\alpha y^3}{3} + \frac{\beta y^4}{4}$ – нелинейный потенциал взаимодействия.
В настоящее время данный феномен широко известен как парадокс Ферми-Паста-Улама (ФПУ) [5]. По-видимому, авторами ожидалось, что любая нелинейность приведет к равнораспределению по энергии между всеми модами колебаний. Такие ожидания были связаны с аналогиями из статистической механики, которая требует релаксации системы к состоянию термодинамического равновесия.
Дискретная модель нелинейной струны только с квадратичной нелинейностью имеет следующий вид:

$$\ddot{y}_n = y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n + \alpha[(y_{n+1} - y_n)^2 - (y_n - y_{n-1})^2], \quad n = 0, 1, \dots N, \quad (6)$$

Данную дискретную систему принято называть $\alpha-$ ФПУ. Так же широко исследуется система $\beta-$ ФПУ, дискретная модель нелинейной струны только с кубической нелинейностью:

$$\ddot{y}_n = y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n + \beta[(y_{n+1} - y_n)^3 - (y_n - y_{n-1})^3], \quad n = 0, 1, \dots N, \quad (7)$$

Модель ФПУ можно представить, как цепочку одинаковых масс, связанных одинаковыми нелинейными пружинами. Такие цепочки очень полезны в изучении различных нелинейных волновых явлений [6]. Пружинки подчиняются закону Гука с небольшими нелинейными поправками. При $\alpha = \beta = 0$ движение в модах независимы. То есть система представляет собой ансамбль N невзаимодействующих осцилляторов. При наличии нелинейности между осцилляторами возникает взаимодействие.
В литературе было предложено два основных подхода к исследованию проблемы ФПУ. Первый подход заключается в анализе динамики системы с помощью предельного перехода [7]. Для этого необходимо постулировать локализацию энергии в пространстве мод, так как возбуждение высокочастотных мод означало бы невозможность непрерывной аппроксимации. Это послужило подспорьем к доказательству что систему $\alpha-$ ФПУ можно преобразовать в уравнение Уравнение Кортевега — де Фриза [7], а из системы $\beta-$ ФПУ можно получить одномерное уравнение Шредингера. Нелинейная природа этих уравнений, как широко известно, порождает солитоны.
Второй подход предполагает анализ зависимости динамики системы от величины энергии решения. Результаты в рамках этой парадигмы были получены Ф.М. Израилевым и Б.В.

Чириковым [8], которые ввели понятие порога стохастичности (или порога равнораспределения) и предложили первую оценку этого порога на основе критерия перекрытия нелинейных резонансов [9]. В данной работе этот подход не будет рассматриваться.
Проинтегрируем ФПУ систему при нулевых начальных условиях,

$$y_0 = y_N = 0. \quad (8)$$

Получаются решения, соответствующие стоячим волнам. При периодических начальных условиях,

$$y_0 = y_N, \quad (9)$$

получим решения, допускающие бегущие волны.

Графовые сверточные нейронные сети. Графовые сверточные нейронные сети (GCNN) являются обобщением сверточных нейронных сетей (CNN) для работы с графами [4]. Графовые сверточные нейронные сети способны извлекать многомасштабные пространственные характеристики посредством использования общих весовых параметров и локализованных фильтров. Графовые сверточные нейронные сети, в отличие от сверточных нейронных сетей, способны работать с неструктурированными данными, определив свертку основанную на структуре графа. Распространяя информацию локальное окружение каждого узла, определенное матрицей смежности, GCNN инвариантны по отношению к порядку, в котором узлы указаны в матрице признаков.
Главной отличительной чертой графовых сверточных нейронных сетей является использование алгоритма обмена сообщениями в нейронных сетях (Message Passing Neural Networks (MPNNs)) [10].
В данной работе мы будем использовать графовые сверточные сети предложенные в [4]. Данную модель будем обозначать GNN (Graph neural network).

Аппроксимация решений $\alpha -$ ФПУ системы с помощью графовой сверточной сети. Рассмотрим систему $\alpha -$ ФПУ для $N = 32$, с параметром нелинейности α и нулевыми граничными условиями [1]:

$$y_0 = y_{32} = 0. \quad (10)$$

На рис.1 представлено начальное состояние системы, задающиеся соотношением:

$$y_n = \sin\left(\frac{\pi n}{L}\right), \quad (11)$$

где $L = 32$, для $n = 0, 1, \dots, 32$.

С помощью метода Рунге-Кутты 4го порядка вычислим эволюцию системы, с шагом $dt = 0.2$ в интервале времени $t_min = 0$; $t_max = 20000$. С параметрами нелинейности α [0.2, … ,0.3] с шагом по $d\alpha$ = 0.005.

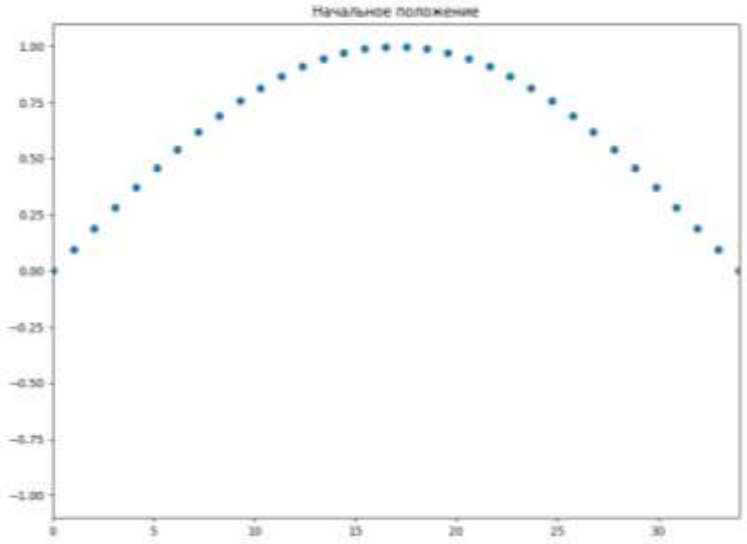


Рис.1. Начальное состояние системы.

Из численных решений получим распределение энергии для первых пяти мод с помощью (4).

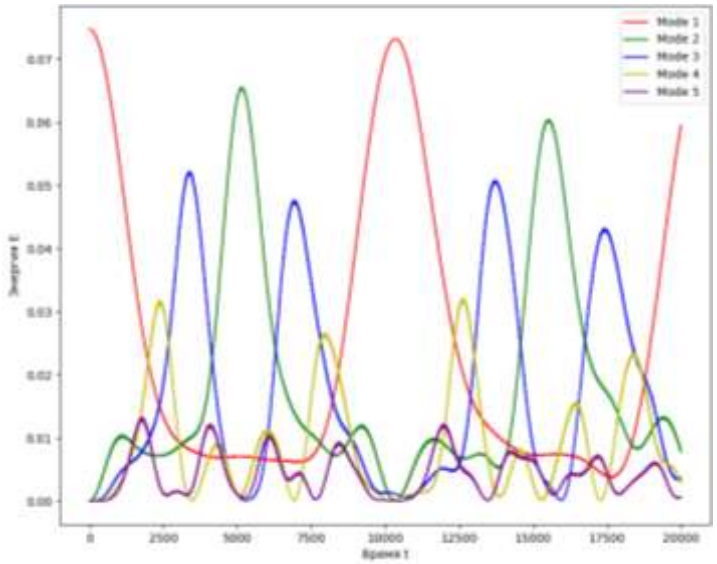


Рис.2. Энергия первых пяти мод для системы $\alpha -$ ФПУ (α=0.25).

Аппроксимируем данные решения графовой сверточной сетью, предложенной в [4]. Для этого сформируем граф, вершины которого задаются тремя величинами (Graph Embeddings):

1. Моментом времени t.
2. Номером массы n = 0, 1, …, N.
3. Параметром нелинейности α.

Каждой вершине графа поставим в соответствие значения $y_n(\alpha, t, n)$.

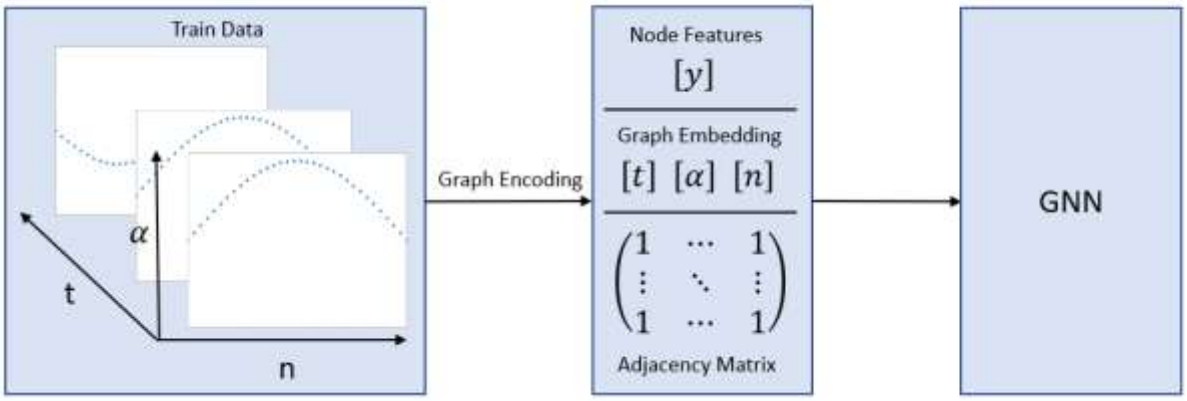


Рис.3. Информация о смещениях представляется в виде графа, где узлы определяются с помощью момента времени t, номером n и параметром нелинейности α. Ребра графа формируются методом radius graph [11].

После тренировки модели, получим энергию распределения первых пяти мод с помощью (4), из выходов модели $y_{nn_n}(\alpha, t)$, предсказанных для α = 0.25, входившую в тренировочную выборку.

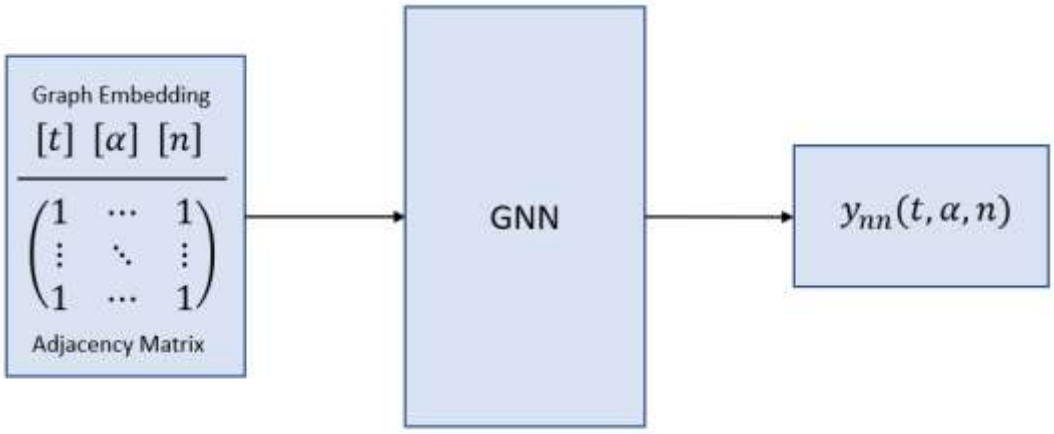


Рис. 4. Процесс получения выхода модели $y_{nn_n}(\alpha, t)$, соответствующий смещениям -го осциллятора, в момент времени t, с параметром нелинейности α.

Вычислим среднюю относительную ошибку MRE (Mean Relative Error) по формуле:

$$MRE_n = \frac{1}{N_{points}} \sum_{i=1}^{N_{points}} \frac{\left|(y_n^i(\alpha, t) - y_nn_n^i(\alpha, t)\right|}{\left|(y_n^i(\alpha, t)\right|}, \quad (12)$$

где $N_{points} = 100000$ – количество состояний, поданных на вход в модель, $y_n(\alpha, t)$ – эволюция смещения -го осциллятрора, полученной числено, $y_nn_n^i$ – выход модели, соответствующий смещению n-го осциллятрора.

Индекс n	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
MRE_n	0.00026	0.00014	0.00013	0.00011	0.00015

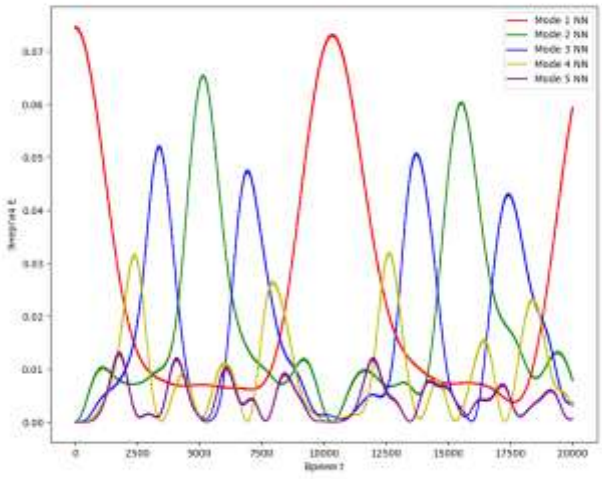


Рис. 5. Энергия первых пяти мод полученных графовой нейронной сетью (α = 0.25).

Теперь получим энергию распределения первых пяти мод, предсказанных моделью для $\alpha = 0.2503$, не входившую в тренировочную выборку. Для сравнения с помощью метода Рунге-Кутты 4 порядка вычислим эволюцию системы, а также энергию первых пяти мод для $\alpha = 0.2503$.

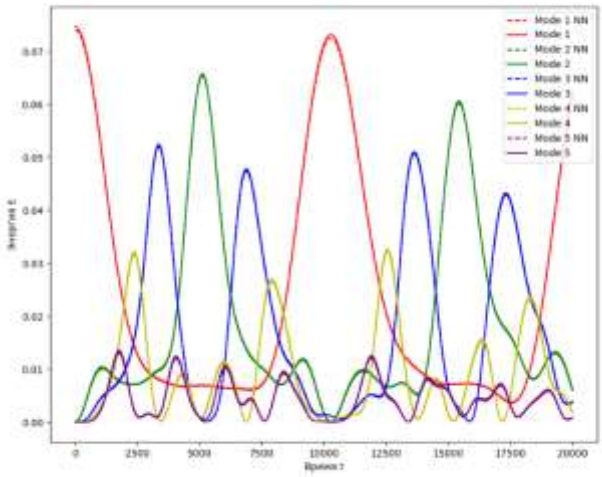


Рис. 6. Сравнение энергии первых пяти мод полученных графовой нейронной сетью (пунктирные линии) для $\alpha = 0.2503$ и энергия первых пяти мод полученных числено (сплошные линии) для $\alpha = 0.2503$.

Вычислим относительную MRE_n по формуле (12) для $n = \overline{1,5}$.

Индекс n	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5
MRE_n	0.00037	0.00011	0.00021	0.00014	0.00016

Список литературы

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics informed deep learning (Part I): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations, https://doi.org/10.48550/arXiv.1711.10561, 2017
2. 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. - 2018. - Vol. 378. Article ID: 686. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045
3. Li Z., Kovachki N., Azizzadenesheli K., Liu B., Bhattacharya K., Stuart A., Anandkumar A. Fourier neural operator for parametric partial differential equation, https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895 , 2020.
4. Ogoke F., Meidani K., Hashemi A., Farimani A.B. Graph convolutional networks applied to unstructured flow field data // Machine Learning: Science and Technology. - 2021. - Vol. 2, No 4. Article ID: 045020. https://doi.org/10.1088/2632-2153%2Fac1fc9
5. Fermi E., Pasta J., Ulamm S. Studies of non linear problems. Los Alamos Scientific Report LA-1940, (May 1955) // Collected Papers of Enrico Fermi, vol. 2. Copyright 1965. The University of Chicago Press. P.977–988.
6. Рабинович М.И., Трубецков Д.И. Введение в теорию колебаний и волн. - М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. - 160 с.
7. Zabusky N.J., Kruskal M.D. Interaction of "solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states // Physical Review Letters. - 1965. - Vol. 15, No 6. - P. 240–243. https://doi.org/10.1103/PhesRevLett.15.240
8. Израйлев Ф.М., Чириков Б.В. Статистические свойства нелинейной струны // Препринт Института ядерной физики СО АН СССР. – Новосибирск: 1965. - 26 с.
9. Чириков Б.В. Резонансные процессы в магнитных ловушках // Атомная энергия. - 1959. - Т. 6, № 6. - С. 630–638.
10. Gilmer J., Schoenholz S., Riley P.F., Vinyals O., Dahl G.E. Neural message passing for quantum chemistry // Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning, Sydney, Australia, PMLR 70, 2017. https://doi.org/10.48550/arXiv.1704.01212
11. https://pytorch-geometric.readthedocs.io/en/latest/generated/torch_geometric.nn.pool.radius_graph.html

Дата поступления: 29 октября 2024 г.