

Классификация траекторий физических систем с помощью лагранжевых нейронных сетей

А. И. Богданов, С. К. Панченко, В. В. Стрижов

bogdanov.ai@phystech.edu; panchenko.sk@phystech.edu; strijov@phystech.edu

В работе решается задача классификации траекторий физических систем. Квазипериодическая динамика системы аппроксимируется лагранжианом, который восстанавливается по обобщённым координатам с помощью лагранжевой нейронной сети. Показано, что для параметров таких сетей выполняется гипотеза компактности: векторы параметров, соответствующие траекториям различных классов, оказываются разделимы в своём пространстве. Проводится эксперимент на датасете RAMAP2, результаты которого подтверждают, что параметры лагранжевых нейронных сетей действительно являются информативным признаковым описанием для задачи классификации.

Ключевые слова: *физическая система, лагранжиан, лагранжева нейронная сеть*

1 Введение

Для моделирования динамики физических систем часто используется лагранжева динамика [5]. В соответствии с ней выбирается набор обобщённых координат, который полностью описывает физическую систему, затем строится лагранжиан L , который определяется как разница между кинетической энергией (T) и потенциальной энергией (V) системы

$$L = T - V.$$

Для получения уравнений движения нужно воспользоваться уравнением Эйлера-Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = 0,$$

полученным из принципа наименьшего действия.

Нейронные сети упрощают моделирование динамики физических систем и классификацию ее траекторий. Для их использования не требуются знание лагранжиана и решение сложных систем дифференциальных уравнений.

Лагранжева нейронная сеть (LNN) [4] аппроксимирует лагранжиан системы, который позволяет перейти к более простому математическому представлению физической системы. С помощью уравнения Эйлера-Лагранжа из этого лагранжиана можно восстановить динамику этой физической системы.

Для параметров лагранжевых нейронных сетей выдвигается гипотеза компактности: векторы параметров, соответствующие траекториям различных классов, оказываются разделимы в своём пространстве. Эти параметры являются признаками в задаче классификации траекторий системы.

Для проверки поставленной гипотезы проводится вычислительный эксперимент на датасете RAMAP2 [1], который содержит размеченные траектории движений человека во время различных активностей.

2 Постановка задачи классификации траекторий физических систем

Задана выборка с метками из n траекторий

$$\{\mathcal{D}_j, z_j\}_{j=1}^n,$$

где:

- $\mathcal{D}_j = \{\mathbf{x}_i^{(j)}, \mathbf{y}_i^{(j)}\}_{i=1}^{m_j}$ – j -ая траектория,
- $\mathbf{x}_i^{(j)} = (\mathbf{q}_i^{(j)}, \dot{\mathbf{q}}_i^{(j)})$ – координаты j -ой траектории движения физической системы,
- $\mathbf{y}_i^{(j)} = \dot{\mathbf{x}}_i^{(j)} = (\dot{\mathbf{q}}_i^{(j)}, \ddot{\mathbf{q}}_i^{(j)})$ – динамика движения физической системы на j -ой траектории,
- $\mathbf{q}_i^{(j)} \in \mathbb{R}^r$ – вектор обобщенных координат,
- r – количество координат,
- m_j – длина j -ой траектории,
- z_j – метка j -ой траектории.

2.1 Задачи регрессии восстановления лагранжиана

Сведём задачу моделирования лагранжиана системы к задаче регрессии. Регрессионная модель для траектории \mathcal{D}_j выбирается из класса нейронных сетей

$$\mathbf{f}_j: (\mathbf{x}, \mathbf{w}) \rightarrow \mathbf{y}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2 \times r}, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{2 \times r},$$

где:

- $\mathbf{w} \in \mathbb{W}$ – параметры модели,
- $\hat{\mathbf{y}}_i^{(j)} = \mathbf{f}_j(\mathbf{x}_i^{(j)}, \mathbf{w}) \in \mathbb{R}^{2 \times r}$ – предсказанная динамика движения физической системы на j -ой траектории,
- $\mathbf{X}_j = \bigcup_{i=1}^{m_j} \mathbf{x}_i^{(j)}$ – матрица координат j -ой траектории движения физической системы,
- $\mathbf{Y}_j = \bigcup_{i=1}^{m_j} \mathbf{y}_i^{(j)}$ – матрица динамики j -ой траектории движения физической системы,
- $\hat{\mathbf{Y}}_j = \bigcup_{i=1}^{m_j} \hat{\mathbf{y}}_i^{(j)}$ – предсказанная матрица динамики j -ой траектории движения физической системы.

Задача моделирования динамики системы представлена в виде задачи минимизации квадратичной ошибки

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathcal{L}(\mathbf{w} | \mathbf{X}_j, \mathbf{Y}_j) = \|\hat{\mathbf{Y}}_j - \mathbf{Y}_j\|_2^2,$$

$$\mathbf{w}_j^* = \arg \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}} (\mathcal{L}(\mathbf{w})).$$

2.2 Задачи классификации траекторий по лагранжианам

После решения задачи моделирования лагранжиана получаем задачу классификации

$$\{\mathbf{w}_j^*, z_j\}_{j=1}^n,$$

где \mathbf{w}_j^* – коэффициенты аппроксимированного лагранжиана j -ой траектории.

Для ее решения используются различные методы классификации, среди которых: логистическая регрессия, ядерный метод с гауссовским ядром, случайный лес.

3 Лагранжевы нейронные сети

3.1 Лагранжева динамика

Лагранжев формализм [4] моделирует физическую систему с координатами траектории $\mathbf{x}_t = (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$, которая начинается в состоянии \mathbf{x}_0 и заканчивается в состоянии \mathbf{x}_1 . Определяется функционал, называющийся действием

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L dt,$$

показывающий путь, по которому координаты \mathbf{x}_t пройдут из \mathbf{x}_0 в \mathbf{x}_1 в промежуток времени от t_0 до t_1 . Путь минимизирует действие S , что приводит к уравнению Эйлера-Лагранжа, определяющему динамику системы

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$$

Ускорение каждой компоненты системы $\ddot{\mathbf{q}}$ может быть напрямую получено из данного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{dL}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\mathbf{q}}{dt} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{d\dot{\mathbf{q}}}{dt} \right) &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \ddot{\mathbf{q}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \ddot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \ddot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} \\ \ddot{\mathbf{q}} &= \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right)^{-1} \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} \right] \\ \ddot{\mathbf{q}} &= (\nabla_{\dot{\mathbf{q}}} \nabla_{\dot{\mathbf{q}}}^T L)^{-1} [\nabla_{\mathbf{q}} L - (\nabla_{\dot{\mathbf{q}}} \nabla_{\mathbf{q}}^T L) \dot{\mathbf{q}}]. \end{aligned}$$

3.2 Лагранжева нейронная сеть

В работе [4] предложено в нейронную сеть

$$f : \mathbf{X} = (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \rightarrow \mathbf{Y}$$

добавить априорные знания о физике системы, учитывая лагранжиан системы

$$f : \mathbf{X} = (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \rightarrow L.$$

Ключевой идеей является параметризовать нейронной сетью лагранжиан L , получить выражение ограничения Эйлера-Лагранжа и обратно распространить ошибку через полученные ограничения

$$\ddot{\mathbf{q}} = (\nabla_{\dot{\mathbf{q}}} \nabla_{\dot{\mathbf{q}}}^T L)^{-1} [\nabla_{\mathbf{q}} L - (\nabla_{\dot{\mathbf{q}}} \nabla_{\mathbf{q}}^T L) \dot{\mathbf{q}}].$$

На рисунке 1 представлена схема работы LNN для задачи моделирования динамики системы. В качестве нейронной сети $f: \mathbf{X} = (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \rightarrow L$ берется полносвязная сеть с 3-мя слоями.

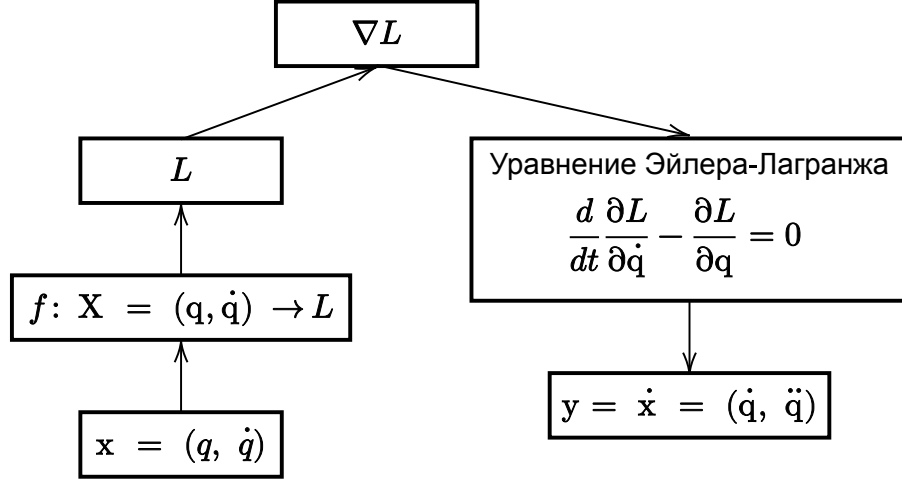


Рис. 1 Схема работы LNN для задачи моделирования динамики физической системы.

4 Вычислительный эксперимент

Для эксперимента используется датасет RAMAP2 [1].

4.1 Данные

- Количество акселерометров: 3,
 - На запястье рабочей руки,
 - На рабочей ноге,
 - На груди.
- Частота акселерометров: 100 Гц,
- Количество классов: $K = 12$,
- Количество испытуемых: 9 человек.

Для эксперимента использовались данные с рабочей ноги и 4 класса.

4.2 Подготовка данных [2]

Данные подверглись следующей процедуре предобработки:

- Восстановлены пропуски данных, связанные с тем, что датчик может пропустить такт. Для использовалась сплайн-интерполяция.
- Посчитаны отсутствующие необходимые данные: ускорения и координаты. Для их получения использовались методы вычислительной математики.
 - Для получения ускорения используется аппроксимация 2-го порядка:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h},$$

- Для получения координаты используется метод Симпсона 3-го порядка аппроксимации:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{N-1} (f(x_{k+1}) + 4f(x_k) + f(x_{k-1})).$$

4.3 Эксперимент [3, 6]

Фиксируется сбалансированная подвыборка из датасета РАМАР2. Для каждой траектории из этой подвыборки с помощью LNN моделируется лагранжиан. Параметры обученной нейронной сети представляют собой признаковое описание данной траектории. Затем с помощью различных классификаторов, таких как логистическая регрессия, ядерный метод с гауссовским ядром, случайный лес, определяется принадлежность к классу.

Избыточная размерность нового признакового описания снижается с помощью метода главных компонент (РСА). Проекция признаков на 2D на и 3D приведены, соответственно, на рисунке 2 и 3.

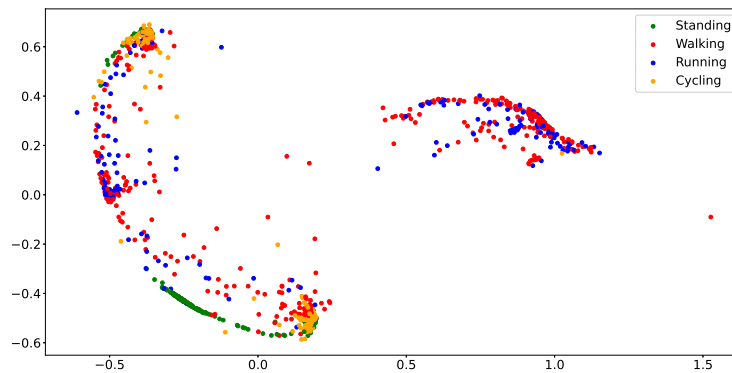


Рис. 2 Распределения данных в 2D

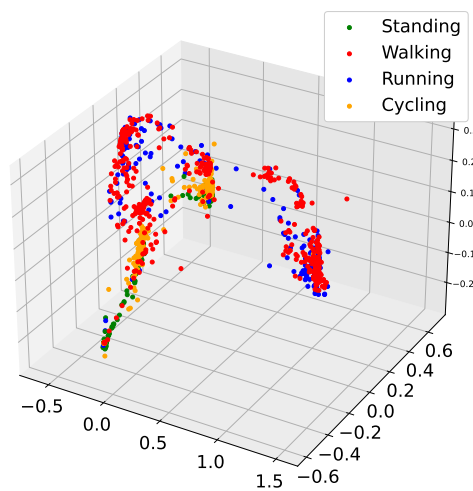


Рис. 3 Распределения данных в 3D

Далее на рисунке 4 приведено сравнение ассигасу от количества главных компонент.

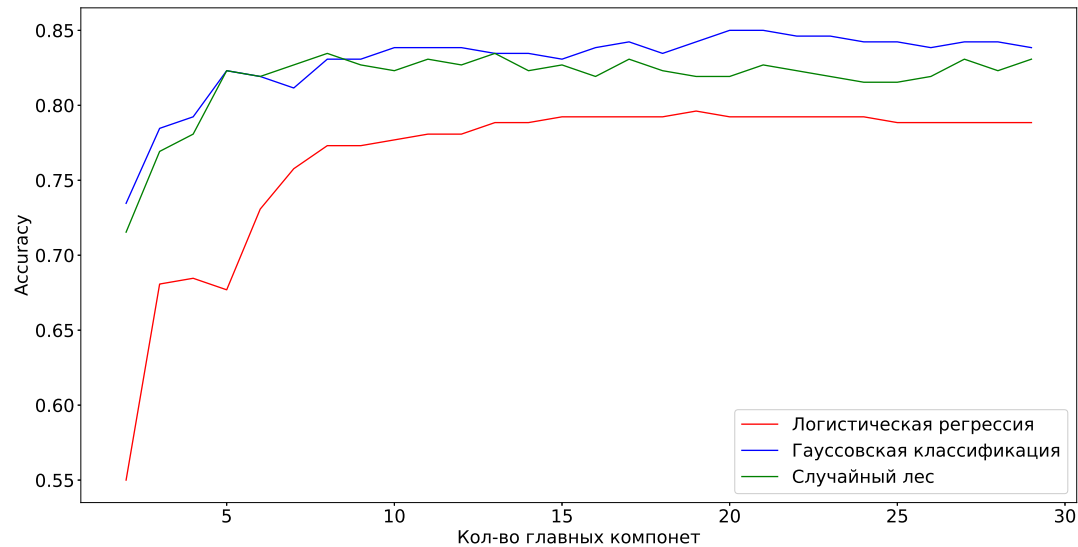


Рис. 4 Ассигасу от количества главных компонент

Наилучшее ассигасу для различных классификаторов со стандартными параметрами:

- Логистическая регрессия: 79%
- Ядерный метод с гауссовским ядром: 85%
- Случайный лес: 83%

5 Заключение

Подтверждена гипотеза компактности: векторы параметров, соответствующие траекториям различных классов, оказываются разделимы в своём пространстве. Тем самым предложен метод решения задачи классификации динамических систем с помощью лагранжевой нейронной сети. Проведен вычислительный эксперимент на датасете РАМАР2, в которых проведено сравнение различных методов классификации.

Литература

- [1] Dataset pmap2. <https://www.kaggle.com/datasets/phamson/pamap2>.
- [2] Github с обработкой датасета. <https://github.com/andreasKyratzis/PAMAP2-Physical-Activity-Monitoring-Data-Analysis-and-ML/blob/master/pamap2.ipynb>.
- [3] Github с экспериментом. <https://github.com/intsystems/2023-Project-114>.
- [4] Miles Cranmer, Sam Greydanus, Stephan Hoyer, Peter Battaglia, David Spergel, and Shirley Ho. Lagrangian neural networks. *arXiv preprint arXiv:2003.04630*, 2020.
- [5] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, J.B. Sykes, and J.S. Bell. *Mechanics: Volume 1*. Course of theoretical physics. Elsevier Science, 1976.
- [6] Северилов Павел. Выбор оптимальной модели в задаче моделирования динамики физической системы. <https://github.com/severilov/master-thesis>.