

Моделирование динамики физических систем с помощью физически-информированных нейронных сетей(Задача классификаций физических траекторий)

Терентьев Александр Андреевич

Московский физико-технический институт

Эксперт: В. В. Стрижов

Консультант: С. К. Панченко

2023

Цель исследования

Задача

Определить вид активности по координатам физической траектории

Требуется

Построить простой, устойчивый, точный алгоритм многоклассовой классификации физических систем

Предлагается

Применить известные алгоритмы классификации к лагранжианам физических систем

Метод

Использование Лагранжевых нейронных сетей для сжатия временных рядов, представленных траекториями для уменьшения количества параметров



Северилов П. А. Выбор оптимальной модели в задаче моделирования динамики физической системы // URL: https://github.com/severilov/master-thesis/blob/main/doc/Severilov2022MasterThesis_rus.pdf.



M. Cranmer, S. Greydanus, S. Hoyer et al. Lagrangian neural networks // ArXiv preprint., 2020. Vol. abs/2003.04630.

Постановка задачи

Дано: $\{ \mathcal{D}_j, z_j \}_{j=1}^n$, где: $\mathcal{D}_j = \{ \mathbf{x}_i^{(j)}, \mathbf{y}_i^{(j)} \}_{i=1}^{m_j}$ – j -ая траектория, $\mathbf{x}_i^{(j)} = (\mathbf{q}_i^{(j)}, \dot{\mathbf{q}}_i^{(j)})$ – i -ые координаты и скорости j -ой траектории, $\mathbf{y}_i^{(j)} = \dot{\mathbf{x}}_i^{(j)} = (\dot{\mathbf{q}}_i^{(j)}, \ddot{\mathbf{q}}_i^{(j)})$ – i -ые скорости и ускорения j -ой траектории, $\mathbf{q}_i^{(j)} \in \mathbb{R}^r$ – вектор обобщенных координат, m_j – длина j -ой траектории, $z_j \in \overline{1, K}$ – метка j -ой траектории.

Требуется

Построить алгоритм $\mathbf{a} : \mathbf{x} \rightarrow \{1, \dots, K\}$

Модель

Модель имеет вид

$$a = b \circ f$$

- b – алгоритм многоклассовой классификации
- f – алгоритм получения параметрически заданного лагранжиана по временному ряду

Проблема задачи классификации траекторий

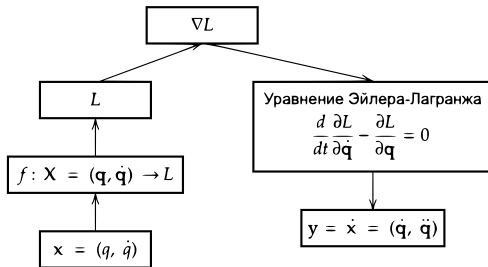
- Огромное кол-во признаков, которыми они задаются
- Необходимо сильно сжимать данные, но с минимальной потерей
- Подвержены временной и пространственной трансляции
- Траектории даже самых простых физических систем, таких как двойной маятник, подвержены сильной изменчивости во времени

- Позволяет сильно сжать данные
- Устойчив к любой симметрии
- Отвечает только за динамику систему
- Подвержен только физически значимым изменениям

- Получаем физическую траекторию и формируем данные
- Устойчив к любой симметрии
- Отвечает только за динамику системы
- Подвержен только физически значимым изменениям

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = Q_x$$

Лагранжева нейросеть



Постановка задачи

$$\{f_k: (\mathbf{w}, \mathbf{X}) \rightarrow \hat{\mathbf{y}} \mid k \in \mathcal{K}\},$$

где $\mathbf{w} \in \mathbb{W}$ – параметры модели, $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{X}, \mathbf{w}) \in \mathbb{R}^{2 \times r \times n}$, $\mathbf{X} = \bigcup_{i=1}^m \mathbf{x}_i$
 $\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)$, $\mathbf{y}_i = \dot{\mathbf{x}}_i = (\dot{\mathbf{q}}_i, \ddot{\mathbf{q}}_i)$

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

Проблемы с данными

- Пропуски во временных рядах
- Временные ряды состоят только из ускорений, либо скоростей

Пропуски во временных рядах

Датчики иногда могут пропускать один или два такта. Для восстановления ряда используется сплайн-интерполяция, которая позволяет получить квадратичную точность от размеров сетки.

Получения необходимых данных о траекториях

Для восстановления ускорения, скорости и координат применятся численное дифференцирования и интегрирования, соответственно методы направленной разности и Рунге-Кутты второго порядка

Дифференцирование

$$f'(x) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}))}{2h}$$

$$|E(f)| \leq \frac{h^2}{6} f^{(3)}$$

Интегрирование

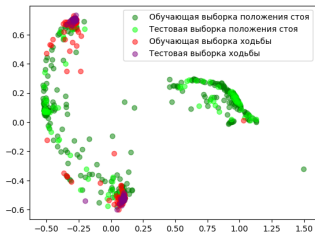
$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{N-1} f(x_{k-1}) + 4f(x_k) + f(x_{k+1})$$

$$|E(f)| \leq \frac{(b-a)}{2880} h^4 \max |f^{(4)}(x)|$$

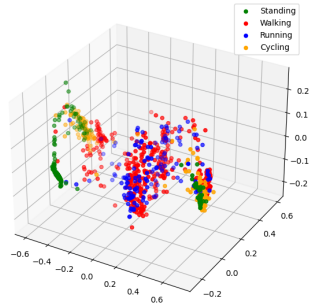
Цель эксперимента

- Проверить способность Лагранжевой нейросети моделировать физические системы
- Подтвердить гипотезу о том, что в линейном пространстве лагранжианов пересечение классов мало по мере по сравнению с размерами самих классов
- Подобрать подходящий под данное распределение алгоритм классификации

Вычислительный эксперимент

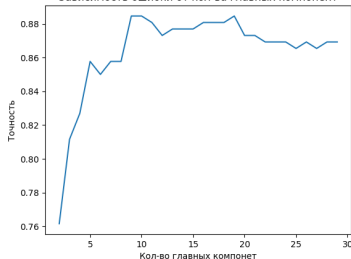


Распределение классов по главным компонентам



- Логистическая регр. – 76%
- Гаусовский проц. – 88%
- Случайный лес – 84%

Зависимость ошибки от кол-ва главных компонент



- Предложен метод классификации траекторий, не зависящий от физически не значимых изменений системы
- Экспериментально показано, что классы траекторий отделимы в пространстве параметров Лагранжиана
- Проведена классификация реальных траекторий движения частей тела людей при различных активностях
- Подтверждена гипотеза компактности для рассматриваемых классов движений