

Классификация траекторий динамических систем с помощью физически-информированных нейросетей

А. А. Терентьев¹, С. К. Панченко¹, В. В. Стрижов

terentev.aa@phystech.edu; panchenko.sk@phystech.edu

¹ФПМИ, МФТИ

В работе решается задача классификации траекторий физических систем. Динамика систем, соответствующих траекториям, моделируется лагранжианом, который аппроксимируется с помощью Лагранжевых нейронных сетей. Показано, что для динамики физических систем, соответствующим различным движениям, выполняется гипотеза компактности функциональных классов лагранжианов. На датасете РАМАР2 проведён эксперимент, результат которого подтверждают, что параметризация с помощью Лагранжевых нейронных сетей является достаточно общей для описания физических систем, а параметры – информативным признаковым описанием для задачи классификации.

Ключевые слова: *физическая система; лагранжиан; лагранжева нейронная сеть; гипотеза компактности*

1 Введение

Одним из способов описания физических систем является лагранжев формализм. Преимущество такого подхода является общность: динамика каждой физической системы исчерпывающим образом описывается лагранжианом, который можно записывать в любых координатах, являющихся параметрами для данной системы. Именно лагранжиан предлагается использовать для классификации траекторий системы.

Для того, чтобы использовать лагранжеву механику, необходимо выбрать обобщенные координаты, которые полностью бы описывали поведение системы, иметь знания о Лагранжиане системы, который определяется как разница между кинетической энергией (T) и потенциальной энергией (V)

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - V(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$$

и величине обобщенных сил системы в случае внешних воздействий. Динамика системы в таком случае описывается системой уравнений Эйлера-Лагранжа:

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

Лагранжиан восстанавливается с помощью Лагранжевых нейронных сетей. Априорные знания о физике системы являются преимуществом данной модели по сравнению с классическими нейронными сетями [1] [2].

Для лагранжианов физических систем утверждается гипотеза компактности: лагранжианы, отвечающие различным движениям, лежат в различных компактных и отделимых подмножествах-классах пространства моделируемых функций. На основе этого делается вывод о том, что векторы параметров функций, соответствующих различным классам, также компактны и отделимы в общем пространстве параметров.

Для проверки гипотезы был произведен вычислительный эксперимент на датасете РАМАР2, который содержит 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,
 $\mathbf{x}_i^{(j)} = (\mathbf{q}_i^{(j)}, \dot{\mathbf{q}}_i^{(j)})$ – 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,
 r – количество координат,
 m_j – длина j -ой траектории,
 $z_j \in \overline{1, K}$ – метка j -ой траектории.

2.1 Лагранжева динамика

Сведём задачу моделирования лагранжиана системы к задаче регрессии. Регрессионная модель для траектории D_j выбирается из класса лагранжевых нейронных сетей и представляет собой композицию:

$$g_j: (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \rightarrow L, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2 \times r}, \quad L \in \mathbb{R},$$

$$\varkappa: L \rightarrow \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{2 \times r},$$

$$\mathbf{f}_j = \varkappa \circ g_j,$$

где:

g_j – параметрическая функция, аппроксимирующая лагранжиан системы,
 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2 \times r}$ – элемент траектории (r обобщенных координат и r обобщенных скоростей),
 $\mathbf{w} \in \mathbb{W}$ – параметры аппроксимирующей лагранжиан модели,
 $L \in \mathbb{R}$ – значение восстановленного лагранжиана,
 \varkappa – функция, реализующая уравнения Эйлера-Лагранжа для нахождения значения обобщенных скоростей и ускорений \mathbf{y} ,
 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{2 \times r}$ – целевой вектор в задаче восстановления лагранжиана (r обобщенных скоростей и r обобщенных ускорений)
 \mathbf{f}_j – финальная композиция g_j и \varkappa , представляющая собой Лагранжеву нейронную сеть.

Задача моделирования динамики системы представлена в виде задачи минимизации квадратичной ошибки:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathcal{L}(\mathbf{w}|\mathcal{D}_j) = \frac{1}{m_j} \sum_{i=1}^{m_j} \|\hat{\mathbf{y}}_i^{(j)} - \mathbf{y}_i^{(j)}\|_2^2,$$

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

где $\hat{\mathbf{y}}_i^{(j)} = \mathbf{f}_j(\mathbf{x}_i^{(j)}|\mathbf{w}) = \kappa(g_j(\mathbf{x}_i^{(j)}|\mathbf{w})) \in \mathbb{R}^{2 \times r}$ – предсказанная динамика движения физической системы на j -ой траектории.

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, гауссовская классификация, случайный лес.

3 Гипотеза о компактности

Пусть \mathbb{L} – функциональное линейное пространство лагранжианов всевозможных систем:

$$g : \mathbf{x} \rightarrow L, \quad g \in \mathbb{L},$$

где $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2 \times r}$ – вектор обобщенных координат и скоростей, $L \in \mathbb{R}$ – значение лагранжиана системы. Пусть также имеется параметрическое семейство функций, аппроксимирующих лагранжиан, описанное в разделе 2.1,

$$\mathbb{L}_\varepsilon = \{g^{(\varepsilon)} : (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \rightarrow L \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2 \times r}, L \in \mathbb{R}, \mathbf{w} \in \mathbb{W}\}, \quad \mathbb{L}_\varepsilon \subset \mathbb{L},$$

где \mathbf{w} – параметры функции из линейного пространства всевозможных значений параметров \mathbb{W} . Данное множество функций \mathbb{L}_ε представляет собой ε -сеть в \mathbb{L} при достаточной сложности модели в силу аппроксимационных свойств нейросетей.

Пусть каждой из $j = \overline{1, n}$ траекторий \mathcal{D}_j , соответствующих различным динамическим системам, описываемым истинными Лагранжианами $g_j \in \mathbb{L}$ и принадлежащих различным классам \mathcal{K}_{z_j} , где $z_j \in \overline{1, K}$, сопоставлена аппроксимация лагранжиана $g_j^{(\varepsilon)}(\mathbf{x}|\mathbf{w}_j^*) \in \mathbb{L}_\varepsilon$ с помощью алгоритма, описанного в разделе 2.1.

[Что-то вводное про 1. меру на \mathbb{L} 2. классы как подмножества в \mathbb{L} (не путать с метками z)] Основа классификации траекторий физических систем лежит в следующей гипотезе:

Определение 1. По определению будем считать, что для пространства \mathbb{L} с борелевской мерой выполняется гипотеза компактности с точностью δ , если B в пространстве \mathbb{L} мера пересечения различных классов мала

$$\delta > 0, \quad \forall i, j, \quad i \neq j \quad \mu(K_{z_i} \cap K_{z_j}) < \delta$$

Мы считаем, что рассматриваемое пространство \mathbb{L} лежит в L_2 и соответственно везде далее считается μ - это борелевская мера на сепарабельном гильбертовом пространстве L_2 . Данное пространство является сепарабельным, т.к. на нем можно ввести ортонормированный базис. Следующая же теорема позволит связать это с классификацией по параметрам нейронных сетей.

Теорема 1. Пусть выполняются для \mathbb{L} гипотеза компактности с точностью δ . А также K_{z_i} или их дополнения по мере ограничены R . Тогда также в пространстве \mathbb{L}_ε при ε стремящемся к нулю мера пересечения различных образов классов под действием g_j^ε мала

$$\delta > 0, \forall i, j, i \neq j \mu(g_j^\varepsilon(K_{z_i}) \cap g_j^\varepsilon(K_{z_j})) < 2 * \delta$$

Доказательство. $\mu(z_i \cap z_j) < \mu(z_i \cap z_j) + \varepsilon * R < 2 * \delta$ □

Если для системы \mathbb{S} выполняется гипотеза компактности с точностью $\delta \ll \min(\mu(z_i))$, то она поддается классификации.

4 Лагранжевы нейронные сети

4.1 Уравнения Эйлера-Лагранжа

Лагранжев формализм моделирует физическую систему с координатами $x_t = (q, \dot{q})$, которая начинается в состоянии x_0 и заканчивается в другом состоянии x_1 . Определяется функционал, который называется действием

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

где L – лагранжиан системы. Действие определяет путь, по которому координаты x_t пройдут из x_0 в x_1 в промежуток времени от t_0 до t_1 . Путь минимизирует действие S , т.е. $\delta S = 0$. Это приводит к уравнению Эйлера-Лагранжа, определяющему динамику системы

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

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

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

где гессиан $(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}} L)_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial q_j \partial \dot{q}_i}$.

Таким образом, алгоритм моделирования динамики системы в лагранжевой динамике:

1. Найти аналитические выражения для кинетической (T) и потенциальной энергии (V)
2. Получить лагранжиан $\mathcal{L} = T - V$
3. Применить ограничение Эйлера-Лагранжа $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}$
4. Решить получившуюся систему дифференциальных уравнений

4.2 Базовая модель Лагранжевой нейронной сети

[Схема нейронной сети]

В работе [2] предложено в нейронную сеть

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

добавить априорные знания о физике системы, моделируя лагранжиан:

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

Ключевой идеей является параметризация нейронной сетью лагранжиана L , получение выражения ограничения Эйлера-Лагранжа и обратное распространение ошибки через полученные ограничения

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

В качестве нейронной сети берется полносвязная сеть с тремя слоями. Таким образом, для заданных координат $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ имеем модель с априорными знаниями о законе сохранения энергии, с помощью которой можем получить динамику параметров $(\dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}})$.

5 Вычислительный эксперимент

5.1 Цель эксперимента

1. Проверить способность Лагранжевой нейросети моделировать физические системы достаточно эффективно по времени.
2. Проверить правильность гипотезы о компактности и используя ее классифицировать траектории физические системы.
3. Подобрать подходящий под данное распределения алгоритм классификации.

5.2 Набор данных для базового эксперимента

Набор данных с акселерометров из датасета РАМАР2.

- Количество акселерометров: $T = 3$.
 - Закрепленный на запястье преобладающей руки;
 - Закрепленный на груди;
 - Закрепленный на локте преобладающей руки.
- Количество классов: $K = 24$.
- Количество испытуемых: $M = 9$.
- Каждая активность длилась минимум 1 час, частота сбора данных 100 Гц.

5.3 Подготовка данных

Для данных, полученных с акселерометров, существует несколько проблем:

1. Пропуски во временных рядах.

2. Временные ряды состоят только из линейных ускорений, либо угловых скоростей.

Поэтому требуется восстановить пропущенные данные, используя интерполяцию, численное дифференцирование и интегрирование.

- Датчики иногда могут пропускать один или два такта. Для восстановления ряда используется сплайн-интерполяция, которая позволяет получить квадратичную точность от размеров сетки.
- Для восстановления ускорения, скорости и координат применяется численное дифференцирование и интегрирование.

Для дифференцирования используется центральная разность [формулу исправить лол тут бред немного]:

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

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

Для интегрирования используется Формула Кортеса:

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

,

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

5.4 Эксперимент

Берется подвыборка из датасета РАМАР2. Для каждого объекта применяется Лагранжева нейросеть, и с её помощью параметризуется лагранжиан.

Для проверки гипотезы построены 2D на Рисунке 2 и 3D на Рисунке 1 графики для соответственно двух и трех параметров, полученных понижением размерности методом главных компонент.

Распределение классов по главным компонентам

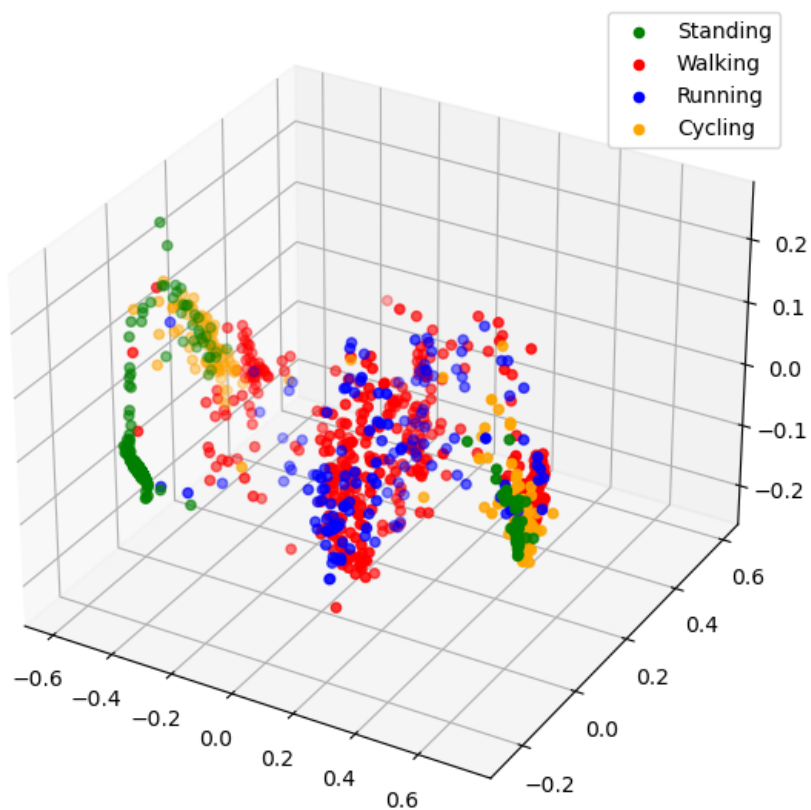


Рис. 1 Распределения данных в 3D

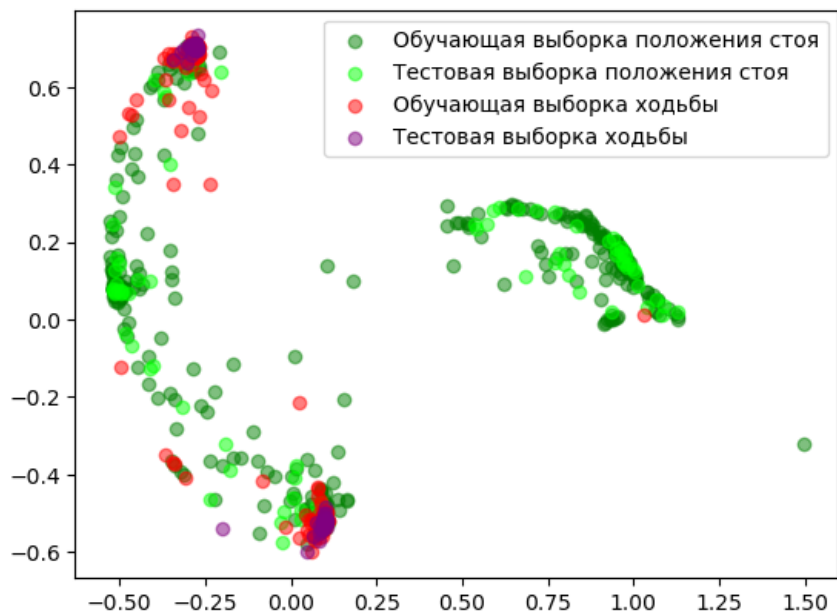


Рис. 2 Распределения данных в 2D

На основе данных признаков описаний, спроецированных на определенное число главных компонент, осуществляется классификация траекторий. На графике представлены значения точности, достигаемые тремя различными алгоритмами. Наилучший результат получился при использовании ядерного метода, при этом для классификации оказалось достаточно 10 главных компонент. Зависимость проиллюстрирована на Рисунке 3.



Рис. 3 Зависимость ошибки от главных компонент

Логистическая регрессия	76%
Ядерный метод	88%
Случайный лес	84%

Таблица 1 Зависимость ошибки от выбранного метода

5.5 Заключение

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.

Литература

- [1] *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.
- [2] *M. Cranmer, S. Greydanus, S. Hoyer et al.* Lagrangian neural networks // ArXiv preprint., 2020. doi: <http://dx.doi.org/Vol.abs/2003.04630>.

Поступила в редакцию