Классификация траекторий динамических систем с помощью физически-информированных нейросетей

Терентьев Александр Андреевич

Московский физико-технический институт,
Физтех-школа прикладной математики и информатики
Кафедра интеллектуальных систем
Научный руководитель: к.ф.-м.н. Исаченко Р.В.

15.06.2024, Москва

Цель работы

Проблема

Существующие методы классификации многомерных рядов не используют слишком громоздкие модели и вычислительно затратны. Либо они требуют большой обучающей выборки для выделения необходимых признаков и свойств изучаемых систем.

Цель

Целью работы является предложить метод для классификации многомерных временных рядов, являющимися траекториями динамических систем, использующие априорную информацию о физической природе рядов.

Идея

Использовать физико-информированный подход, для классификации рядов.

Постановка задачи классификации многомерных рядов

Дано

Дана выборка $D = \{(X_i, y_i)\}_{i=1}^N$, где X_i – траектории размерности r и длинной T, $y_i \in \overline{1, K}$ – метка i-ой траектории
Траекторией размерности r и длинной T назовем $X = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_T)$ такой, что $\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)$, $\dot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – скорость в i-ый момент времени, $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^r$ – координата в i-ый момент времени

Найти

Требуется найти метод классификации $p(\hat{y}|X, D) = p(\hat{y}|L, D)p(L|X)$, где $\hat{y} \in \overline{1, K}^N$ – предсказанные метки классов, $p(L|X)$ - метод сопоставления траектории X лагарнжиану L. В работе в качестве метода рассматривается точечная оценка $p(L|X) = [L = \hat{L}]$

Критерий

Модели сравниваются с помощью метрик Accuracy и F1Macro

Постановка задачи восстановления трактории

Дано

Дана выборка $D = \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)\}_{i=1}^N$, где $\mathbf{y}_i = \ddot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – ускорение в i-ый момент времени.

Найти

Требуется найти функцию $p(\hat{\mathbf{y}}|X, D) = p(\hat{y}|X, L)p(L|D)$, где D – данная обучающая выборка, $\hat{Y} = \hat{\ddot{X}} = \{\hat{\mathbf{y}}_i = \hat{\ddot{\mathbf{q}}}_i\}_{i=1}^N$ – предсказанная динамика траектории, $L \in Q$, где Q - это семейство рассматриваемых функций

Критерий

В качестве функции потерь берется средняя квадратичная ошибка

$$\mathcal{L}(\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{T} \|\hat{\mathbf{y}}_i - \mathbf{y}_i\|_2^2,$$

Лагарнжева нейронная сеть

$$\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i) \xrightarrow{\hat{L}\colon (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \to L_{\mathbf{x}}} L_{\mathbf{x}} \xrightarrow{\nabla L} \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \xrightarrow{\ddot{\mathbf{q}}_i = g(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)} \mathbf{y}_i = \ddot{\mathbf{q}}_i$$

Рис.: Схема нейронной сети

Параметризация

$p(L|D),\ L \in Q = \{\hat{L}\colon (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \to L_{\mathbf{x},\mathbf{w}}\}$ $\hat{L}$ - полносвязная нейронная сеть с функцией активации SoftPlus, w - параметры нейронной сети.
$p(L|D) = [L = \hat{L}]$, где $\hat{L}$ – ОМП лагранжиана системы, полученная из $\mathcal{L}(\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) \to min$

Система для нахождения ускорений

$$p(\hat{y}|X, L) : \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L\right) \ddot{\mathbf{q}} = \left[\nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}\right].$$

Модификация сети

В исходной архитектуре сети в каждой точки траектории мы решаем СЛАУ. Проблема в том, что у матрицы $H_L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L$ собственные значения могут быть сколь угодно маленькими.

$$H\hat{\ddot{\mathbf{q}}} = \hat{b} = \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L\right)^{-1} \left[\nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}\right]$$

$$\hat{\ddot{\mathbf{q}}} = H^{-1} \left[\nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}\right].$$

$$H\ddot{\mathbf{q}} = b$$

Тогда изменим функцию потерь так, чтобы штрафовать за собственные значения матрицы H меньше 1, а вместо разности ускорений возьмем невязку для полученной СЛАУ

$$\mathcal{L}^{mod}(\mathbf{w}) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{T} \|\hat{\mathbf{b}}_i - \mathbf{b}_i\|_2^2 + \alpha \mathrm{act}(\beta(\lambda(H_{\ddot{q}}) - 1)).$$

Идея классификатора

$$A(L) = \nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}},\, H(L) = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L$$

$$X \xrightarrow{LNN} \hat{L} = g(x|w) \xrightarrow{L_N^i = A(L)(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)} L_N \in \mathbb{R}^N \xrightarrow{\text{classifier}: R^N \to K} \hat{y}$$

$$Q_N \sim U([-L, L]^{2r})$$

Рис.: Схема нейронной сети

Аппроксимация нормы

$$\overline{|A(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)|^2 + \|H(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)\|_2^2}$$

$$\|H(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)\|_2^2 \approx const$$

Эквивалентность нахождения минимума невязки и отклонения ускорений

Норма

$$p(\hat{y}|X, L) : \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L\right) \ddot{\mathbf{q}} = \left[\nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}\right].$$

$$A(L) = \nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}, H(L) = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L$$

$$\|L\|_L = \|(A(L), H(L))\|_2$$

$$A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\ddot{\mathbf{q}} \tag{1}$$

Теорема(Терентьев, 2024)

$\|\delta L\|_L = 0 \Leftrightarrow$ п.в. $\delta\ddot{q} = 0$, где
$\delta L = L' - L,\ \delta\ddot{q} = \ddot{q}' - \ddot{q},$ где $L',\ L \in \mathcal{X}$ являются вариациями лагранжиана и ускорения на множестве $\mathcal{X}$, на котором функциональное уравнение 1 относительно L имеет единственное решение, и $\forall L \in \mathcal{X} :\ \mathbf{H}(L) \not\equiv 0$,.

Эквивалентность приближенной задачи исходной

Теорема(Терентьев, 2024)

Пусть есть конечное семейство непересекающихся замкнутых выпуклых множеств $\mathcal{A}$ в нормированном пространстве $\mathbb{L}$, тогда существует $\epsilon > 0$, что для любого преобразования пространства ϕ такое, что $\|\phi(\mathcal{A}_i) - \mathcal{A}_i\| < \epsilon$ множества из семейства $\phi\mathcal{A}$ попарно сильно отделимы.

Эквивалентность исходной оптимизационной задачи и задачи с ограничениями

$$\mathcal{L}^{mod}(\mathbf{w}) = \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}\|\hat{\mathbf{b}}_i - \mathbf{b}_i\|_2^2 + \alpha \text{act}(\beta(\lambda(H_{\ddot{q}}) - 1)).$$

Теорема(Терентьев, 2024)

Если лагранжианы заданы на компакте, то существуют неотрицательные числа a, b такие, что $detH \geq a$, а собственные значения матрицы H не меньше b

Аппроксимация нормы

$$A(L) = \nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}, H(L) = \nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L$$

$$\|L\|_L = \|(A(L), H(L))\|_2$$

$$A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\ddot{\mathbf{q}}$$

Лемма(Терентьев, 2024)

Исходная норма $\|\cdot\|_L$ с любой наперед заданной точностью ϵ приближается l_2-нормой, при стремлении числа сэмплов N и меры пространства из которого берут сэмплы Ω к бесконечности

$$\|(A(L), H(L))\|_2 = \sqrt{\int |A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})|^2 + \|H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\|_2^2 d\Omega} \approx$$

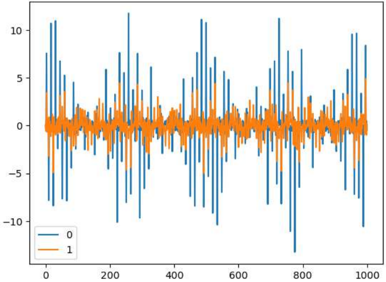
$$\mu(\Omega) \cdot \overline{|A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})|^2 + \|H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\|_2^2}$$

Вычислительный эксперимент

Исследования проводились на наборе данных Physical Activity Monitoring(PAMAP2) Набор данных содержит записи с трех наборов гироскопов и акселерометров: закрепленных на запястье преобладающей руки, закрепленных на груди, закрепленных на локте преобладающей руки. Число испытуемых: $M = 9$. Число видов активностей(классов): $K = 24$, каждая активность длилась 2-4 минуты , частота сэмплирования 100 Гц.

Остатки траектории в зависимоти от регуляризации

Возьмем синтетический набор данных для траекторий двойного маятника и построим график остатков в случае регуляризации и без.



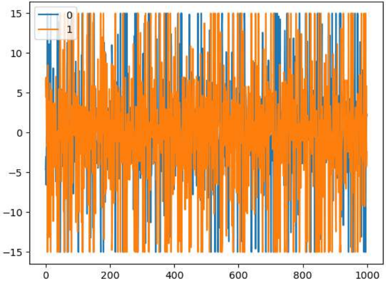
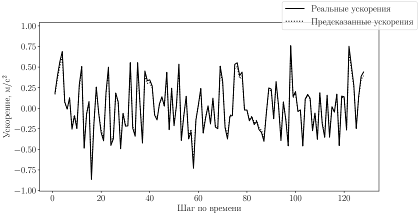
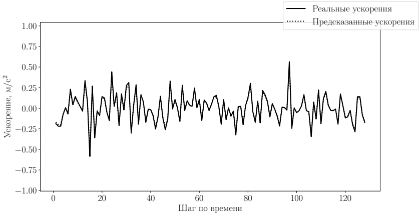


Рис.: График остатков для траектории двойного маятника, слева с регуляризацией, справа без

Восстановление динамики системы



(a) Исходный ряд



(b) Предсказанный ряд

Рис.: Временной ряд зависимости ускорения от времени для тестовой выборки

Распределение классов в пространстве Лагранжианов

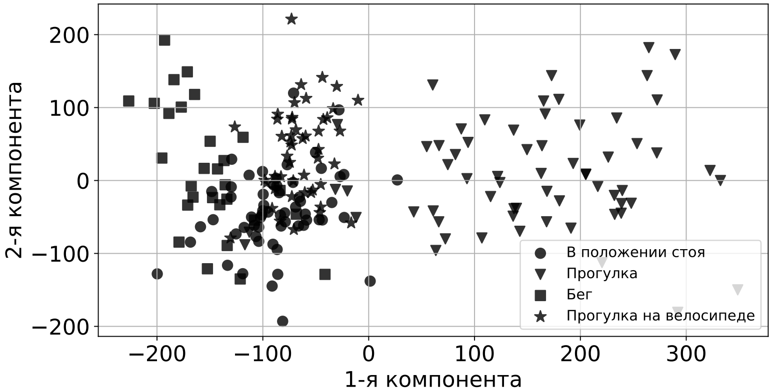


Рис.: Проекция пространства лагранжианов на плоскость

Результат работы классификаторов

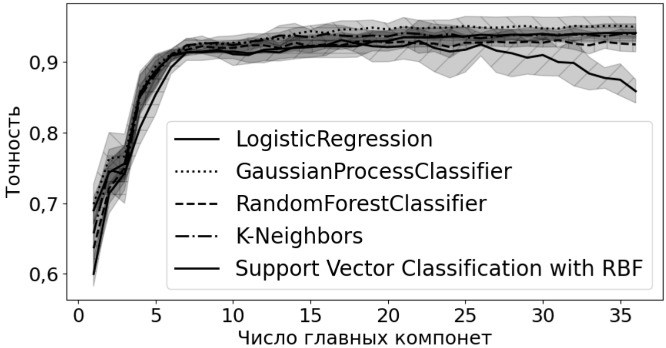


Рис.: Точность классификации выбранных метод в зависимости от количества главных компонент

Результат работы классификаторов

Классификатор	Метрика		
	Accuracy	Balanced-accuracy	F1 Macro
Логистическая регрессия	$0,927 \pm 0.014$	$0,924 \pm 0,13$	$0,927 \pm 0,14$
Гауссовский процесс	$\mathbf{0,946} \pm \mathbf{0,010}$	$\mathbf{0,941} \pm \mathbf{0,011}$	$\mathbf{0,946} \pm \mathbf{0,010}$
Случайный лес	$0,932 \pm 0,007$	$0,928 \pm 0,008$	$0,933 \pm 0,008$
K-ближайших соседей	$0,939 \pm 0,009$	$0,935 \pm 0,010$	$0,940 \pm 0,008$
SVC с гауссовским ядром	$0,933 \pm 0,012$	$0,927 \pm 0,013$	$0,933 \pm 0,011$

Таблица: Результат классификаторов на предложенной векторизации данных

Выносится на защиту

1. Предложен метод физико-информированного подхода к классификации многомерных временных рядов, на основе классификации систем их порождающие.
2. Предложен метод оценки лагарнжиана системы на основе LNN-сетей и регуляризация устраняющая нефизические колебания системы.
3. Доказано, что, если исходные лагранжианы отделимы, то и их оценки тоже отделимы.
4. Доказана эквивалентность задачи нахождения минимума невязки и отклонения ускорений, и показаны достаточные условия для этого.
5. Доказано, что выбранная проекция пространства лагранжианов приближает норму с любой наперед заданной точностью.
6. Исследованы методы метрической классификации в данном пространстве и показано, что линейные классификаторы дают лучшие метрики классификации.