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.

27.06.2024, Москва

Классификация траекторий динамических систем

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 и регрессии многомерных рядов

Задача классификации

Дано

$D = \{(X_i, y_i)\}_{i=1}^N$, где $y_i \in \overline{1, K}$ – метка i-ой траектории

$X = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_T)$, $\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)$, $\dot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – скорость в i-ый момент времени, $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^r$ – координата в i-ый момент времени

Найти

$p(\hat{y}|X, D) = p(\hat{y}|L, D)p(L|X)$, где $\hat{y} \in \overline{1, K}^N$ – предсказанные метки классов

Критерий

Метрики Accuracy и F1Macro

Задача регрессии

$D_X = \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)\}_{i=1}^N$, где $\mathbf{y}_i = \ddot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – ускорение

$p(\hat{\mathbf{y}}|\mathbf{x}, D_X) = p(\hat{\mathbf{y}}|\mathbf{x}, L)p(L|D_X)$
$\hat{\mathbf{y}}_i = \hat{\ddot{\mathbf{q}}}_i$ – предсказанная динамика траектории, $L \in Q$

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

Лагарнжева нейронная сеть

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

Схема нейронной сети

Параметризация

1. $p(L|D)$, $L \in Q = \{\hat{L}\colon (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \to L_{\mathbf{x},\mathbf{w}}\}$ $\hat{L}$ - полносвязная нейронная сеть с функцией активации SoftPlus, w - параметры нейронной сети.
2. $p(L|D) = [L = \hat{L}]$, 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 функции потерь с регуляризацией

В исходной архитектуре сети в каждой точки траектории решается 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

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

Идея классификатора

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

$$\begin{tikzcd}
X \arrow[r, "\mathrm{LNN}"] & \hat{L} = g(x|w) \arrow[rr, "L_N^i = A(L)(\mathbf{q}_i{,}\dot{\mathbf{q}}_i)"] & & L_N \in \mathbb{R}^N \arrow[r, "\mathrm{classifier}: R^N \to K"] & \hat{y} \\
& Q_N \sim U([-L, L]^{2r}) \arrow[ur] & & &
\end{tikzcd}$$

Схема нейронной сети

Аппроксимация нормы

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

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

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 нахождения минимума невязки и отклонения ускорений

Норма

$$
\begin{aligned}
p(\hat{y}|X, L) : \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L\right) \ddot{\mathbf{q}} &= \left[\nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}\right]. \\
A(L) = \nabla_q L - \left(\nabla_{\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q}} L\right) \dot{\mathbf{q}}, \mathbf{H}(L) &= \nabla_{\dot{\mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}}} L, \\
\|L\|_L &= \|(A(L), \mathbf{H}(L))\|_2, \\
A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) &= H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\ddot{\mathbf{q}}. \qquad (1)
\end{aligned}
$$

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 исходной оптимизационной задачи и задачи с ограничениями

Было доказано, что выбранные ограничение на множество искомых функций не уменьшает общность задачи нахождения динамики. Рассматривается следующая функция потерь

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

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

Исходное пространство бесконечномерное. Для задачи классификации требуется спроецировать его на евклидово пространство. Рассмотрим норму

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

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

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

Теорема (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)

1. Записи с трех наборов гироскопов и акселерометров: закрепленных на запястье преобладающей руки, закрепленных на груди, закрепленных на локте преобладающей руки
2. Число испытуемых: $M = 9$
3. Число видов активностей(классов): $K = 24$
4. Каждая активность длилась 2-4 минуты
5. Частота сэмплирования 100 Гц

Остатки траектории в зависимоти от регуляризации

Использовался синтетический набор данных для траекторий двойного маятника. Из графика остатков следует, что без регуляризации получается неинформативное предсказание динамики.

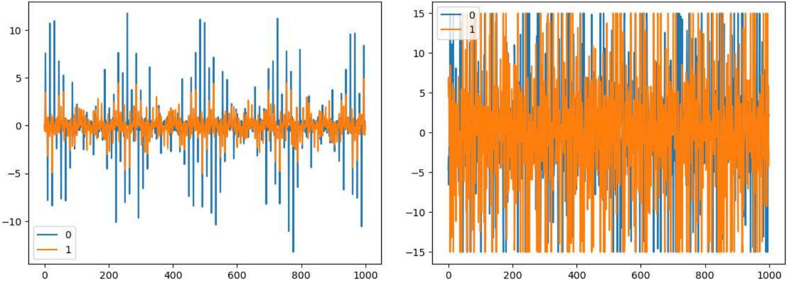
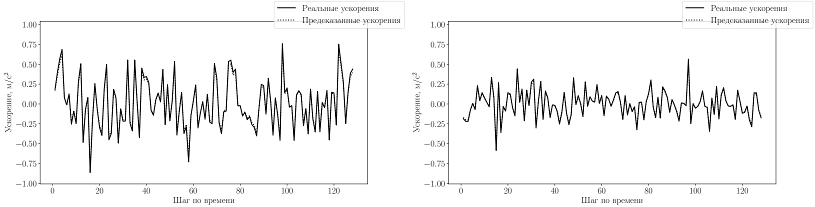


График остатков для траектории двойного маятника, слева с регуляризацией, справа без

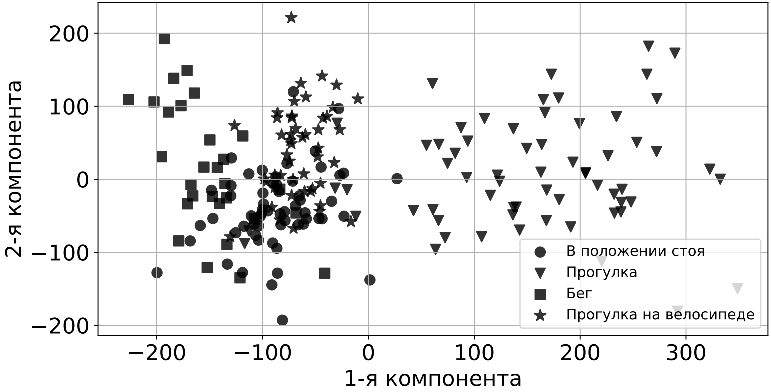
Восстановление динамики системы



Временной ряд зависимости ускорения от времени для тестовой выборки

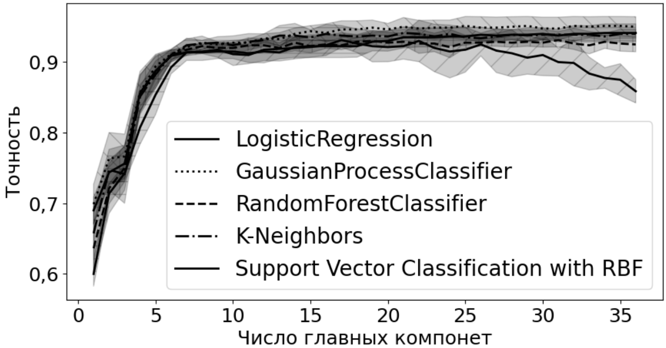
1. Из полученных графиков следует, что точность восстановления динамики системы, требуемая для задачи классификации, достается.
2. Нефизические осцилляции отсутствуют

Распределение классов в пространстве Лагранжианов



Проекция пространства лагранжианов на плоскость

Сравнение качества работы классификаторов



Точность классификации выбранных методов в зависимости от количества главных компонент

Сравнение качества 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	$\mathbf{0,946 \pm 0,010}$	$\mathbf{0,941 \pm 0,011}$	$\mathbf{0,946 \pm 0,010}$
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	$0,933 \pm 0,012$	$0,927 \pm 0,013$	$0,933 \pm 0,011$

Точность классификации на предложенной векторизации данных

1. Линейные классификаторы лучше справляются с классификацией, меньше переобучаются
2. Среди линейных классификаторов лучше всего себя показывает гауссовский процесс
3. Логистическая регрессия имеет тенденцию к переобучению

Выносится на защиту

1. Предложен метод физико-информированного подхода к классификации многомерных временных рядов, на основе классификации систем их порождающие.
2. Доказано, что выбранная векторизация сохраняет отделимость классов.
3. Доказано, что выбранная проекция пространства лагранжианов приближает норму с любой наперед заданной точностью и эквивалентность нахождения минимума невязки и отклонения ускорений и условия для этого.
4. Исследованы методы метрической классификации в данном пространстве и показано, что линейные классификаторы дают лучшие метрики классификации.