Классификация траекторий динамических систем с помощью физически-информированных нейросетей

Терентьев Александр

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

18.05.2024, Москва

Цель работы

Проблема

Существующие методы классификации многомерных рядов не имеют априорных знаний о динамике, изучаемых систем. Методы используют слишком громоздкие модели. 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

Каждому временному ряду сопоставить динамическую систему. Классифицировать не траектории, а динамические системы.

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 $X = [X_1, X_2, , , , , X_T]$ такой, что $X_i = [\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i]$, $\dot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – 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 $D = \{(X_i, \dot{X}_i)\}_{i=1}^{N}$, где X – траектории размерности r и длинной T, $\mathbf{y}_i = \dot{X}_i = \ddot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – 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, $\hat{Y} = \hat{\dot{X}} = \{\hat{\mathbf{y}}_i = \hat{\ddot{\mathbf{q}}}_i\}_{i=1}^{N}$ – 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

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

Рис.: Схема нейронной сети

Параметризация

$p(L|D),\ L \in Q = \{f : (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \to L_{\mathbf{x},\mathbf{w}}\}$ $f : (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \to L(\mathbf{x}|\mathbf{w})$ - 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

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

Теоретические результаты о эквивалентности нахождения минимума невязки и отклонения ускорений

Lemma

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

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

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

Lemma

$\|L\|_L = 0 \Leftrightarrow$ *п.в.* $\delta\ddot{q} = 0$, *где* $\delta L, \delta\ddot{q}$ *являются вариациями лагранжиана и ускорения.*

Аппроксимация нормы

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

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

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

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

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

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

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

Результат регуляризации

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

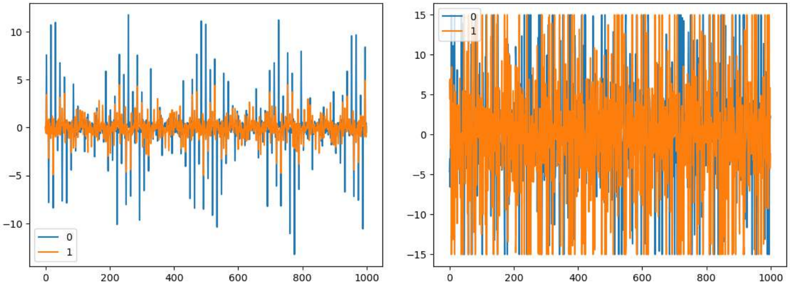
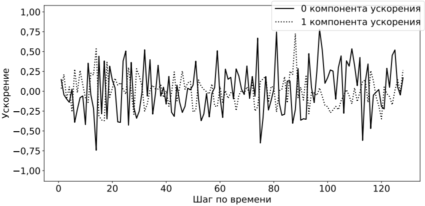
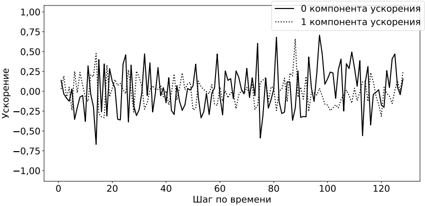


Рис.: График остатков для траектории двойного маятника, слева с регуляризацией, справа без

Вычислительный эксперимент



(a) Исходный ряд



(b) Предсказанный ряд

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

Кривые обучения

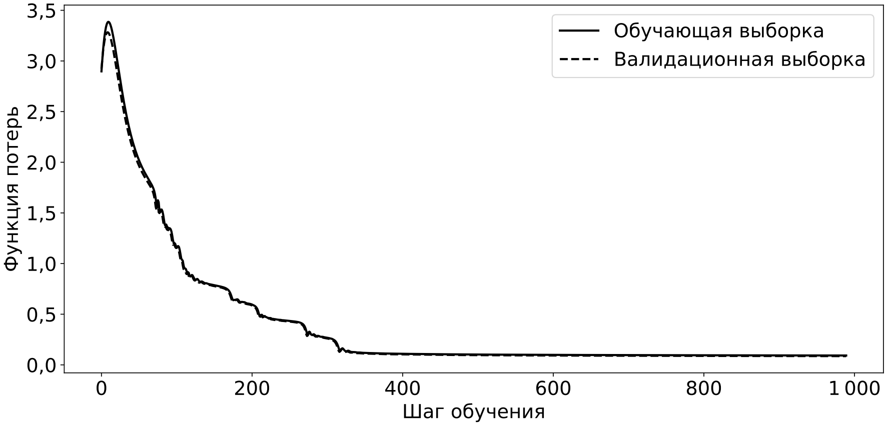


Рис.: График обучения модели

Вычислительный эксперимент

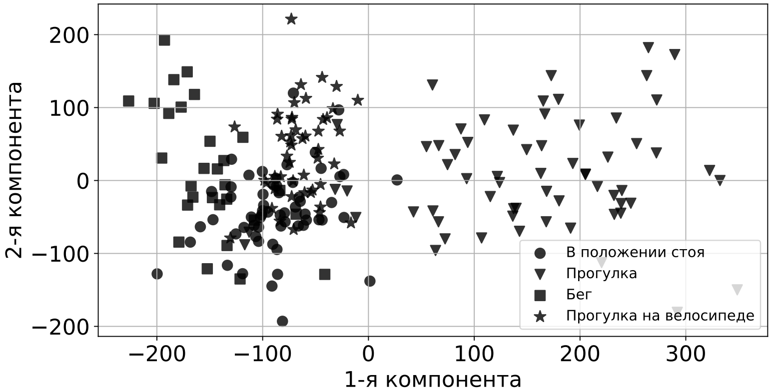


Рис.: Распределения данных в 2D

Вычислительный эксперимент

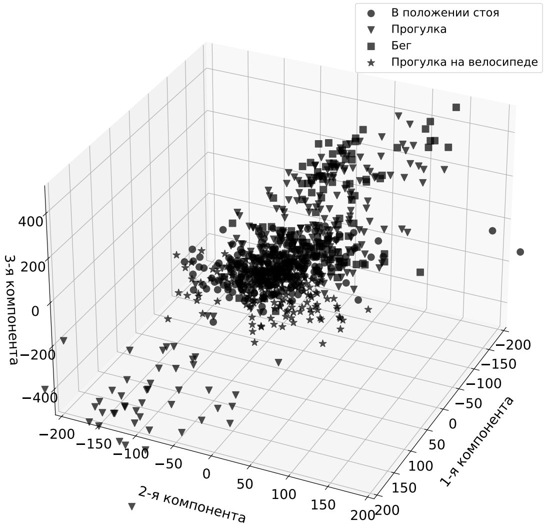


Рис.: Распределения данных в 3D

Вычислительный эксперимент

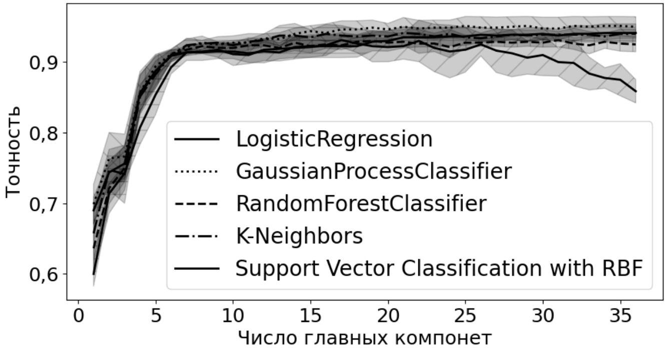


Рис.: Точность классификации выбранных метод в зависимости от количества главных компонент

Вычислительный эксперимент

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	$0,933 \pm 0,012$	$0,927 \pm 0,013$	$0,933 \pm 0,011$

Таблица: Результат классификаторов на предложенной векторизации данных

Выносится на защиту

1. Предложен метод физико-информированного подхода к классификации многомерных временных рядов, идея которого заключается в классификации не самих рядов, а систем, порождающих данные ряды.
2. Предложен метод оценки лагарнжиана системы на основе LNN-сетей и регуляризация устраняющая нефизические колебания системы.
3. Доказано, что в пространстве с предложенной метрикой лагранжианы линейно разделимы. А также показана линейная разделимость по результатам эксперимента.
4. Исследованы методы метрической классификации в данном пространстве и показано, что линейные классификаторы дают лучшие метрики классификации.