

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 длиной T , $y_i \in \overline{1, K}$ – метка i -ой траектории. Траекторией размерности r и длиной T называется $X = [X^1, X^2, \dots, X^T]$ такой, что $X^j = (\mathbf{q}^j, \dot{\mathbf{q}}^j)$, $\dot{\mathbf{q}}^j \in \mathbb{R}^r$ – скорость в j -ый момент времени, $\mathbf{q}^j \in \mathbb{R}^r$ – координата в j -ый момент времени.

Найти

Метод классификации $p(\hat{y}|X, D)$, где $X = \{(X_i)\}_{i=1}^N$ – набор длины N траекторий размерности r и длиной t , D – данная обучающая выборка, $\hat{y} \in \overline{1, K}^N$ – предсказанные метки классов.

Критерий

Модели сравниваются с помощью метрики Асигасы = $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\hat{y}_i = y_i]$, \hat{y}_i – предсказанные моделью метки траектории, \hat{y} – класс, которому принадлежит траектория.

Постановка задачи восстановления траектории

Дано

Дана выборка $D = \{(X_i, \dot{X}_i)\}_{i=1}^N$, где X – траектории размерности r и длиной 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 $\hat{\mathbf{y}} = f(\mathbf{X} = (\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) | D)$, где D – данная обучающая выборка, $\hat{Y} = \hat{X} = \{\hat{\mathbf{y}}_i = \hat{\ddot{\mathbf{q}}}_i\}_{i=1}^N$ – предсказанная динамика траектории

Критерий

В качестве функции потерь берется средняя квадратичная ошибка

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

Лагранжева нейронная сеть

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

Рис.: Схема нейронной сети

Параметризация

$g: (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \rightarrow L$ - полносвязная нейронная сеть с функцией активации SoftPlus, \mathbf{w} - параметры нейронной сети. Данная сеть по координатам и скоростям восстанавливает значение лагранжиана. Иными словами g – приближенный лагранжиан системы.

Система для нахождения ускорений

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

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.

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

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

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

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

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

Результат регуляризации

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

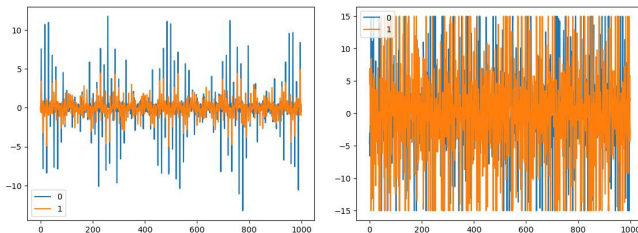


Рис.: График остатков для траектории двойного маятника, слева с регуляризацией, справа без

Теоретические результаты о эквивалентности нахождения минимума невязки и отклонения ускорений

Lemma

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

$$A(L) = \nabla_q L - (\nabla_{\dot{q}q} L) \dot{q}, H(L) = \nabla_{\dot{q}\dot{q}} L$$
$$\|L\|_L = \|(A(L), H(L))\|_2$$

Lemma

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

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

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

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

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

Идея классификатора

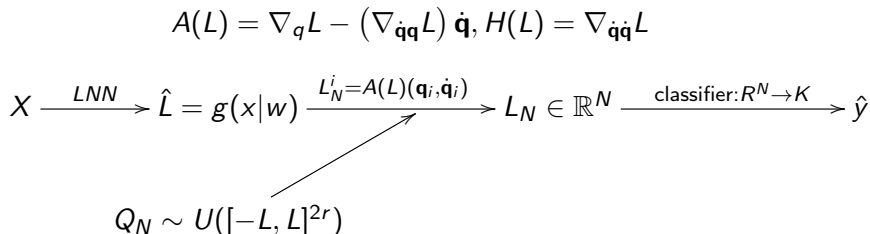
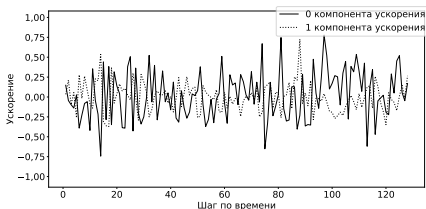


Рис.: Схема нейронной сети

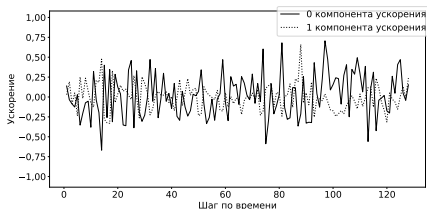
Аппроксимация нормы

$$\begin{aligned}
 & \overline{|A(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})|^2 + \|H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\|_2^2} \\
 & \|H(L)(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})\|_2^2 \approx \text{const}
 \end{aligned}$$

Вычислительный эксперимент



(a) Исходный ряд



(b) Предсказанный ряд

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

Кривые обучения

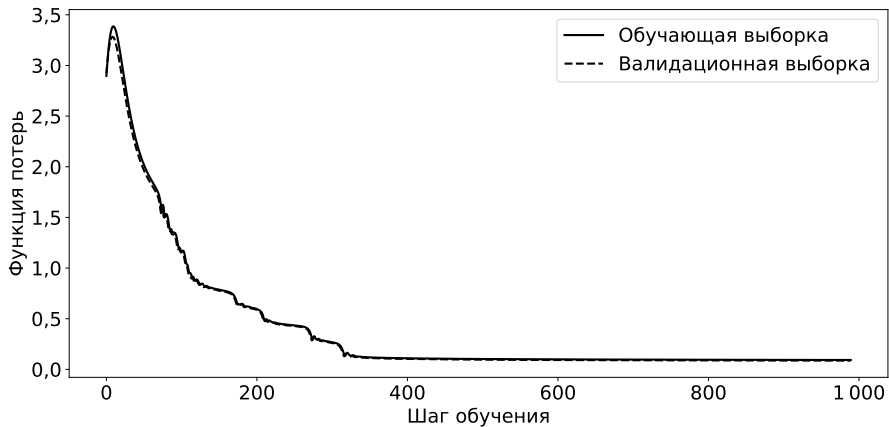


Рис.: График обучения модели

Вычислительный эксперимент

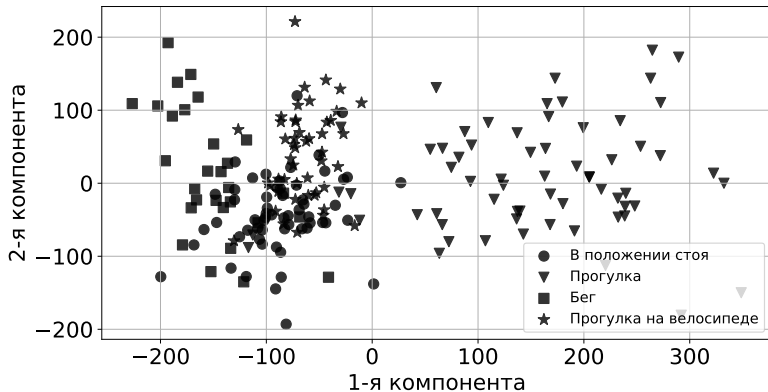


Рис.: Распределения данных в 2D

Вычислительный эксперимент

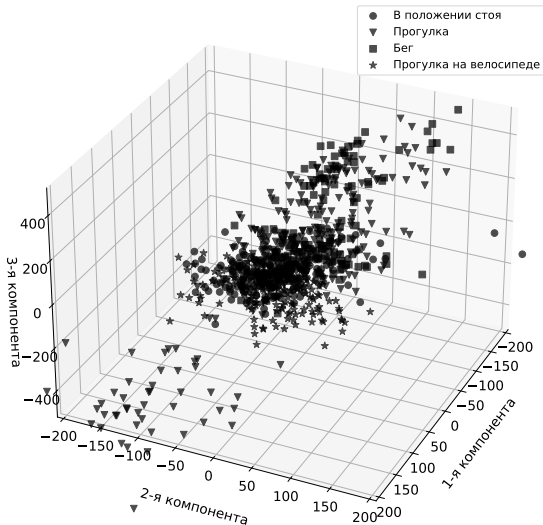


Рис.: Распределения данных в 3D

Вычислительный эксперимент

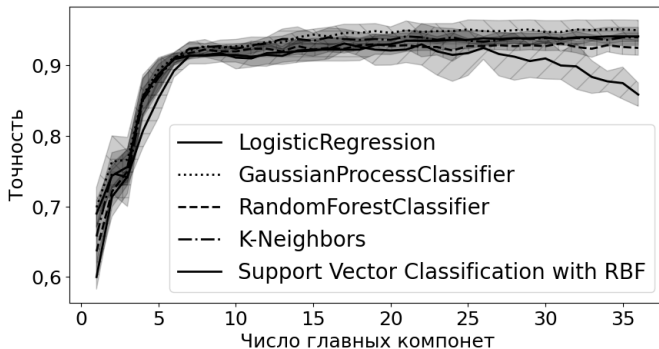


Рис.: Точность классификации выбранных метод в зависимости от количества главных компонент

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	$0,946 \pm 0,010$	$0,941 \pm 0,011$	$0,946 \pm 0,010$
Случайный лес	$0,932 \pm 0,007$	$0,928 \pm 0,008$	$0,933 \pm 0,008$
К-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 работ классификаторов на предложенной векторизации данных

Представлен метод классификации траекторий по параметризованным лагранжианам, аппроксимирующим лагранжианы динамических систем, для которых траектории получены. Получена модифицированная LNN-сеть дающая вычислительно устойчивую аппроксимацию лагранжиана, которая в дальнейшем исследуется как функция в нормированном пространстве. Исследован способ проекции векторов данного пространство на конечномерное пространство, такая, что разность норм в исходном пространстве и спроецированном не превышает заранее заданную величину. Для уменьшения размерности применен метод главных компонент. вычислительный эксперимент показал, что для данной выборки достаточно оставить $N = 10$ главных компонент и при увеличении числа которых метод не улучшается. Для классификации полученных объектов взят SVC с гауссовским ядром, дающий точность на валидационной выборке $Accuracy = 0.95 \pm 0.02$