

Обратные задачи моделирования nPDE

Александр Терентьев

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

21 декабря 2024 г.

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

$X = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T)$, $\mathbf{x}_i = (\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i)$, $\dot{\mathbf{q}}_i \in \mathbb{R}^r$ – 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, $L \in Q$

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

Лагранжева нейронная сеть

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

Схема нейронной сети

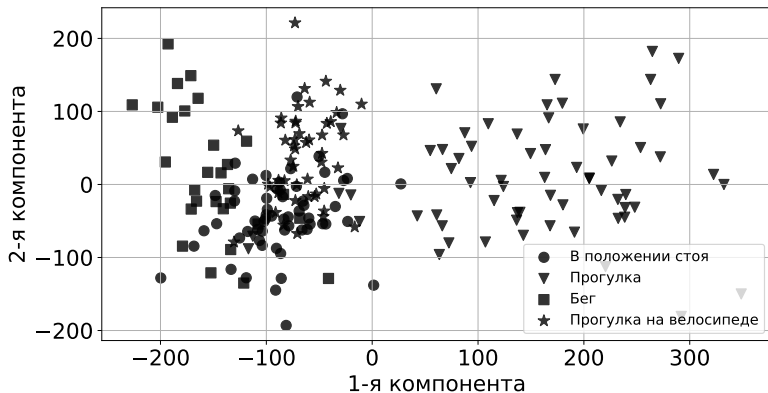
Параметризация

1. $p(L|D)$, $L \in Q = \{\hat{L}: (\mathbf{x}|\mathbf{w}) \rightarrow L_{\mathbf{x},\mathbf{w}}\}$ \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 $\mathcal{L}(\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) \rightarrow \min$

Система для нахождения ускорений

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

Распределение классов в пространстве Лагранжианов



Проекция пространства лагранжианов на плоскость

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	$0,946 \pm 0,010$	$0,941 \pm 0,011$	$0,946 \pm 0,010$
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	$0,933 \pm 0,012$	$0,927 \pm 0,013$	$0,933 \pm 0,011$

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

Обратные задачи моделирования nPDE

Проблема

В задачах ЭЭГ трудность вызывает получение точного сигнала от головного мозга. Высокая чувствительность прибора к движениям и тремору, обусловленному психоэмоциональным напряжением пациента, вызывает помехи в работе, что может затруднить диагностику.

Цель

Целью работы является предложить метод решения восстановления источников сигнала ЭЭГ и уменьшения уровня шума в их определении.

Решение

Предлагается использовать физико-информированный подход, использующийся в задачах восстановления временных рядов, вносящий априорные знания о модели для уменьшения уровня шума от данных.

Определения задачи обратного восстановления ЭЭГ

Дано

- ▶ $\mathcal{D} = \{X_i\}_{i=1}^N$ - набор данных пространственно-временных рядов ЭЭГ, где $X_i = \chi(r, t) : \mathbb{R}^3, \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^K$ - пространственно-временной ряд сигналов K .
- ▶ $\mathcal{S} = \{s_i\}_{i=1}^M$ - набор источников сигналов

Найти

$D(\hat{s}|X, \mathcal{D})$ - кластеризация пространственно-временных рядов ЭЭГ X_i по M источникам

$G(\hat{X}(t+1)|X(t), \hat{s}, \mathcal{D})$ - восстановление пространственно-временных рядов ЭЭГ X_i на основе s источника

Критерий

MSE - ошибка предсказаний рядов $\|\hat{X} - X\|_2$

Необходимость физико-информированного подхода

Необходимость физической модели

- ▶ Для лечения эпилепсии необходимо максимально точно определить источник сигнала
- ▶ Датчики снаружи головы сильно подвержены внешними воздействиями
- ▶ Часто источники находятся глубоко внутри головы

Недостатки методов

- ▶ Аналитическая физическая модель устойчива к шуму, но слишком упрощает картину и неточна
- ▶ Модели не учитывающие физику дают не интерпретируемые результаты
- ▶ Задача классификации неприменима, т.к. источник - это скрытая переменная

Развитие идеи физико-информированного подхода

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

Схема нейронной сети из предыдущей работы

$$\chi_i : (N_x \times N_y \times N_z \times T) \xrightarrow{D(\hat{s}|X, \mathcal{D})} s \xrightarrow{G(\hat{X}|X(t), \hat{s}, \mathcal{D})} \hat{\mathbf{X}}$$

Схема предложенного метода

Пространственно-временной ряд

Формально пространственно-временной ряд χ можно записать как ряд поля $E(\mathbf{r})_t$. Таким образом задача состоит в нахождении в источниках поля E

Уравнения в частных производных

В работе предлагается использовать уравнения в частных производных для восстановления динамики поля. В общем виде это можно записать так

$$A\left(s, r, t, E, \frac{\partial E}{\partial \mathbf{r}}, \frac{\partial E}{\partial t}, \dots\right) = 0$$

Подход к решению PDE

Информация о физике системы

Для того чтобы внести физическую информацию о системе необходимо записать физический закон по которому изменяется система в представленной форме.

Электромагнитное поле

Рассматриваемое нами поле по сути является физическим электромагнитным полем с добавленным шумом от различных помех. Поэтому достаточно ограничиться электромагнитными физическими системами.

Уравнения Максвелла

Информация о физике системы

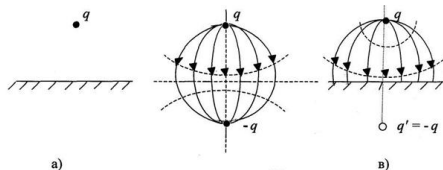
Наиболее общим подходом будет использовать уравнения Максвелла

- ▶ Нейросеть D восстанавливает внутренние токи j_i заряды q по ЭЭГ
- ▶ По теореме единственности есть только один такой набор для результатов ЭЭГ.
- ▶ По внутренним токам и зарядам и уравнений Максвелла получается PDE на поле \hat{E}
- ▶ С помощью nPDE данные уравнения решаются и восстанавливается поле \hat{E}

Критерий

$$\|\hat{E} - E\|_2^2$$

Уравнения Максвелла

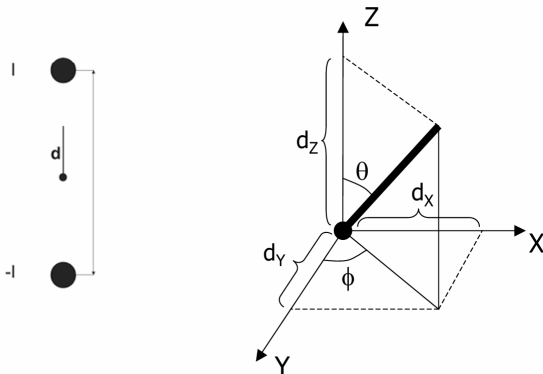


Метод зеркальных изображений

Уравнения Максвелла

- ▶ $\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho$
- ▶ $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
- ▶ $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
- ▶ $\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$

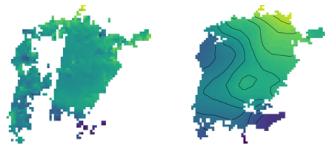
Использование диполей для решения уравнений Максвелла



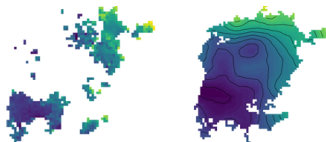
Дипольные параметры

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\text{dip}}, \mathbf{d}) = \frac{\mathbf{d} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{dip}})}{4\pi\sigma \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{dip}}\|^3}$$

Эксперимент по линейной модели для восстановления поля



Данные по температуре поверхности озера за 1996 год. Слева наблюдаемые, справа предсказанные.



Данные по температуре поверхности озера за 2011 год. Слева наблюдаемые, справа предсказанные.