Классификация траекторий динамических систем с помощью физически-информированных нейросетей

Терентьев Александр[1], Вадим Стрижев[2]

[1]ФПМИ
МФТИ [2]Научный руководитель

Презентация НИР, December 2023

Предсказательная часть сети

За основу классификационного берется физически-информированная лагранжева нейросеть. Ее основная идея состоит в восстановлении функции Лагранжа рассматриваемой системы.

Функция потерь

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \frac{1}{m_j} \sum_{i=1}^{m_j} \|\hat{\ddot{\mathbf{q}}}_i^{(j)} - \ddot{\mathbf{q}}_i^{(j)}\|_2^2,$$

Динамика выводится из уравнений Эйлера-Лагранжа

Система для нахождения ускорений

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

Проблемы прямого подхода

Если решать эту задачу напрямую, то мы встречаемся с проблемой. Решение является неустойчивым, оно не является гладким как того требует физика. А главное для такой функции невозможно проводить никакие дальше исследования. Ее значения скачут и методы сильно зависят от удачности выбора точек. Требуется какая-то модификация

Регуляризация

Поэтому требуется некоторая регуляризация задачи. Вся загвоздка заключается в том, что мы находим значения ускорения из решения СЛАУ

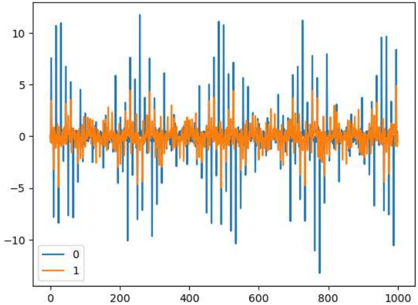
$$H_{\ddot{q}}\ddot{q} = b$$

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

В идеале $(H_{\ddot{q}}) = 1$, т.е. алгоритм должен присвоить всем массам в системе значения 1. Тогда добавим в нашу функцию потерь слагаемое, штрафующее за отклонение собственных значений от 1

$$\mathcal{L}^{mod}(\mathbf{w}) = \frac{1}{m_j} \sum_{i=1}^{m_j} \|\hat{\mathbf{y}}_i^{(j)} - \mathbf{y}_i^{(j)}\|_2^2 + \alpha g(\beta((H_{\ddot{q}}) - 1)),$$

Результаты



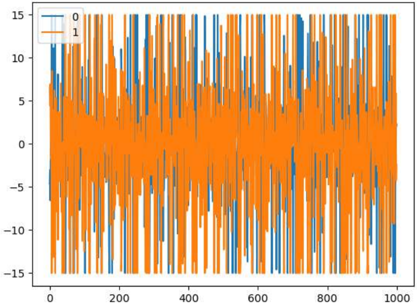


Рис.: Отклонения предсказания ускорения для тестовой выборки при разных значениях коэффициента регуляризации

Фазовые портреты

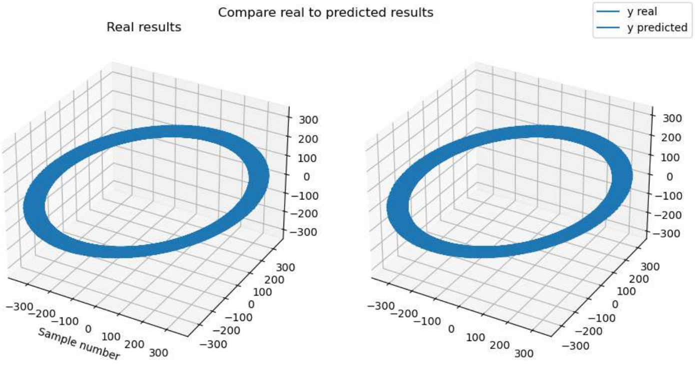


Рис.: Фазовые траектории предсказанных и реальных траеткорий

Кривые обучения

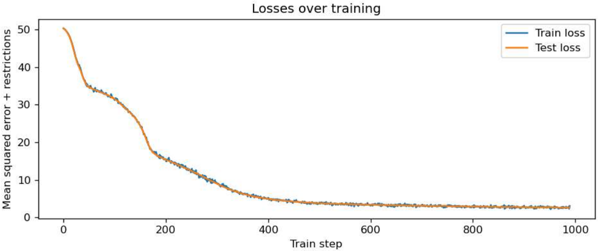


Рис.: Зависимость среднеквадратичного отклонения + ограничений от шага обучения

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

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

Lemma

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

Теоретические результаты для выбора нормы

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

$$\sum_{i_1=1,\dots,i_n=1}^{N,\dots,N} |A(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)|^2 + \|H(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)\|_2^2) \frac{\Delta X_1 \cdot \dots \cdot X_n}{N \cdot \dots . \cdot N} =$$

$$C \cdot \sum_{i_1=1,\dots,i_n=1}^{N,\dots,N} \frac{A(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)^2 + \|H(L)\left(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}\right)\|_2^2}{N \cdot \dots . \cdot N} =$$

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

Теоретические результаты для выбора нормы

Theorem

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.*

Вычислительный эксперимент

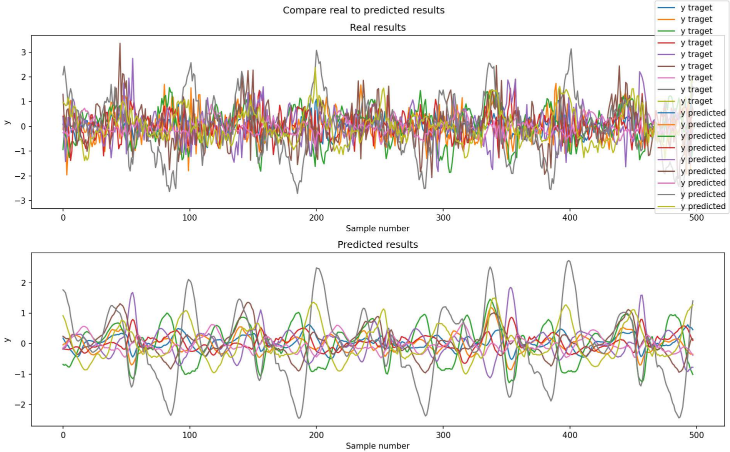


Рис.: Временной ряд предсказанного ускорения в зависимости от времени для траектории

Идея классификатора

Аппроксимация нормы

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

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

Если мы перейдем от признаков $(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})$ к признаковому пространству $A(L)(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})$, то мы перейдем к пространству с евклидовой нормой. Осталось зафиксировать точки в которых мы сэмплируем значения функции. Используя метод Монте-Карло Мы получаем набор $S = \{s_i\}$ из $N = 2000$ точек $(\mathbf{q},\ \dot{\mathbf{q}})$ равномерно распределенных на кубе $-a \leq x_i \leq a$. Кол-во точек подбирается так, чтобы соответствующая норма не сильно менялось при увеличении числа точек.

Вычислительный эксперимент

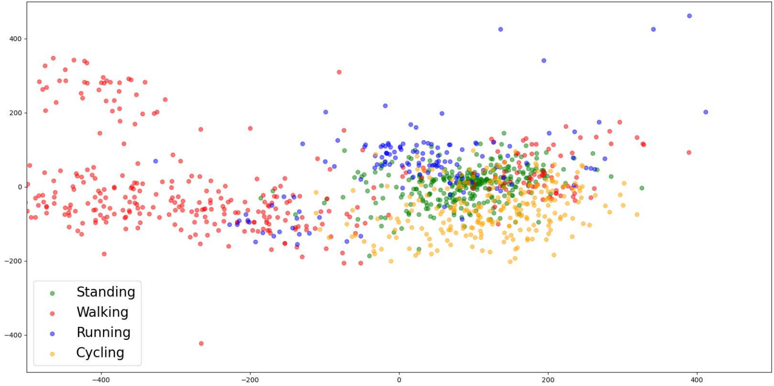


Рис.: Распределения данных в 2D

Вычислительный эксперимент

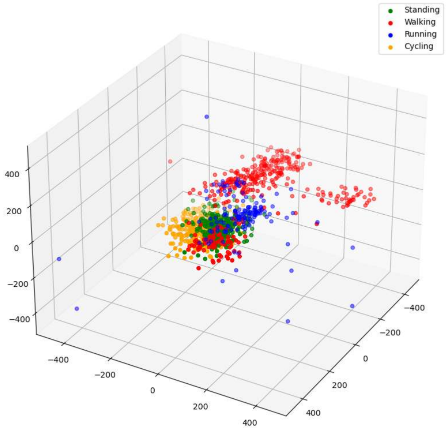


Рис.: Распределения данных в 3D

Вычислительный эксперимент

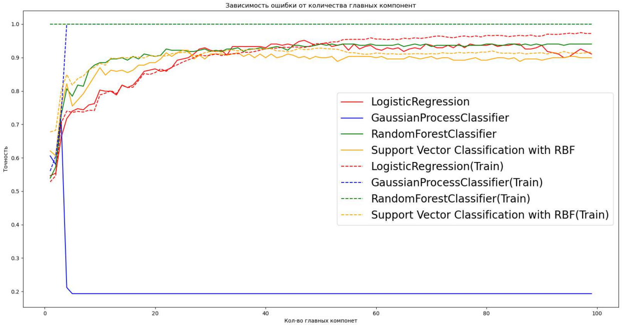


Рис.: Точность классификации выбранных метод в зависимости от количества главных компонент