A pendulum video and autoencoder

Pietro Sillano

February 15, 2022

1 Introduzione

L'uso di reti neurali o deep learning per la previsione della dinamica di sistemi dinamici presenta alcune criticitá, tra cui problemi di generalizzazione al di fuori degli esempi del training set e inoltre una mancanza di interpretabilitá del modello ottenuto, dovuta al grande numero di parametri di tali modelli.

2 Task

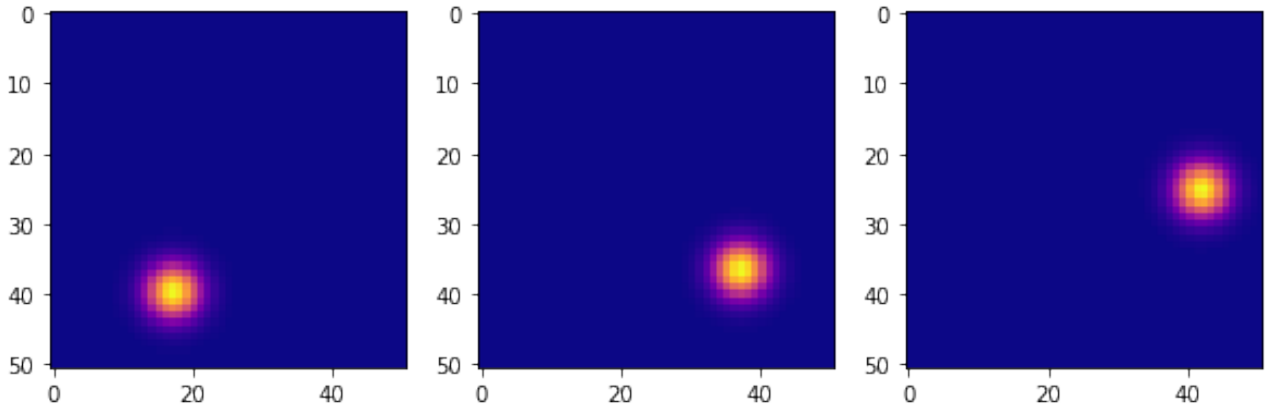
L'obiettivo consiste nell' individuare un set di equazioni che possa catturare la dinamica del sistema e che sia allo stesso tempo il piú semplice possibile. L'idea del paper considerato consiste nel combinare un **autoencoder** che effettui una riduzione di dimensionalitá dell'input e un metodo chiamato **SINDy**(Sparse Identification of Nonlinear Dynamics) che riesce a individuare un modello dinamico per il sistema nelle nuove coordinate latenti.
Infatti, non sempre i dati che vengono raccolti rappresentano la dinamica del sistema nella migliore o nella piú semplice rappresentazione possibile per cui SINDy fallirebbe o identificherebbe dei modelli con molti parametri.
Mentre gli autoencoder effettuano riduzioni di dimensionalitá ma non garantiscono che le nuove variabili nel latent space avranno dei modelli dinamici associati semplici. Risulta quindi opportuna l'uso di questi due metodi simultaneamente, in modo da identificare correttamente la dinamica ma allo stesso tempo avere un modello dinamico semplice.

3 Metodi

3.1 Dataset

Il dataset considerato é una collezione di snapshot (immagini 51x51 pixel) di un video di un pendolo. Il dataset utilizzato é generato sinteticamente(maggiori dettagli in appendice) per cui si ha una certa libertá nella creazione del dataset.
Per generare il dataset sono state usate 100 condizioni iniziali per θ_0 e 100 per ω_0 combinandole assieme e escludendo le condizioni iniziali per cui la dinamica del pendolo non é un ciclo limite. Complessivamente quindi abbiamo circa 5000 condizioni iniziali differenti, per ognuna di queste abbiamo 100 snapshot e ogni snapshot é un samples con 2601(51x51) features.

Figure 1: Tre samples del dataset considerato, immagine 51 x 51 pixels.



3.2 Architettura della rete

L'architettura utilizzata é un semplice autoencoder fully connected. L'autoencoder impara una rappresentazione non lineare dell'input in un latent space ridotto rispetto alla dimensionalitá dei samples. L'encoder ha come input $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ con $n = 2601$ e effettua una trasformazione di coordinate $\mathbf{z}(t) = \phi(\mathbf{x}(t)) \in \mathbb{R}^d$ dove d é la dimensione dello spazio latente ridotto. Mentre il decoder effettua una traformazione $\tilde{\mathbf{x}} \approx \psi(\mathbf{z})$ cercando di ricostruire l'input originario. La rete é composta da:

- encoder: 3 layer fully connected da 128, 64, 32 neuroni
- un layer nascosto formato da pochi neuroni che agisce come latent space,
- decoder: 3 layer fully connected invertiti rispetto all'encoder, quindi 32, 64, 128 neuroni.

L'architettura presentata nel paper é stata riscritta in PyTorch. [1]

3.3 Sindy: Sparse Identification of Nonlinear Dynamical systems

É un metodo di sparse regression applicato ad una libreria di possibili funzioni candidate per ricostruire la dinamica di sistemi dinamici (anche non lineari). [3]
Per costruire il modello dinamico a partire dai dati di input usiamo una libreria di funzioni e riformuliamo il problema sotto forma di regressione:

$$\dot{Z} = \mathbf{\Theta}(Z)\mathbf{\Xi}$$

La matrice $\mathbf{\Theta}(Z)$ é costruita combinando assieme funzioni candidate:

$$\mathbf{\Theta}(Z) = \begin{pmatrix} z_1(t_0) & z_2(t_0) & z_3(t_0) & ... & sin(x_1(t_0)) & \sqrt{x_2(t_0)} & ... \\ z_1(t_1) & ... & ... & & & & \\ ... & ... & & & & & \\ z_1(t_f) & & & & & & \end{pmatrix} \tag{1}$$

Mentre la matrice incognita $\mathbf{\Xi}$ contiene i coefficienti che determinano i termini attivi della matrice theta. Idealmente vorremmo la matrice sparsa in modo da avere pochi termini selezionati dalla $\mathbf{\Theta}$. I coefficienti ξ sono aggiornati dalla rete durante il training come i pesi ω della rete.

$$\mathbf{\Xi} = \begin{pmatrix} \xi_{1,1} & \xi_{1,2} & \xi_{1,3} \\ \xi_{2,1} & ... & ... \\ \xi_{3,1} & & \end{pmatrix} \tag{2}$$

Per esempio, se volessi ricostruire la dinamica del sistema unidimensionale $\dot{x} = \sin(x)$ avrei:

$$\dot{X} = \begin{pmatrix} x(t_0) & x^2(t_0) & \sqrt{x(t_0)} & \sin(x(t_0) & ... \\ x(t_1) & ... & ... & & \\ ... & ... & & & \\ x(t_f) & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ ... \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(x(t_0)) \\ \sin(x(t_1)) \\ \sin(x(t_2)) \\ ... \\ ... \\ \sin(x(t_f)) \end{pmatrix} = \sin(X) \tag{3}$$

3.4 Loss

I due metodi vengono combinati tra di loro tramite la funzione di costo L; infatti non sará semplicemente la MSE loss (mean squared loss) tra l'input x dell' autoencoder e la ricostruzione $\tilde{x}$ ma vengono aggiunti termini che garantiscono oltre alla ricostruzione dell'input, anche la ricostruzione delle derivate temporali $\dot{x}$ e $\dot{z}$ e infine un termine di regolarizzazione L1 sui coefficienti $\boldsymbol{\Xi}$.
Per un dataset con m samples di input, ogni loss é definita come segue:

- $L_{recon} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \|x_i - \tilde{x_i}|_2^2$ misura quanto l'autoencoder riesce a ricostruire l'input x.
- $L_{dz} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \|\dot{z}_i - \Theta(z_i)\boldsymbol{\Xi}\|_2^2$ misura quanto il modello predica correttamente la derivata temporale delle variabili intrinseche z.
- $L_{dx} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \|\dot{x}_i - \dot{\tilde{x}}_i\|_2^2$ misura quanto le predizioni di Sindy ossia $\dot{\tilde{x}}$ ricostruiscono l'input originale $\dot{x}$.
- $L_{reg} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \|\boldsymbol{\Xi}\|_1$ é una regolarizzazione L1 che promuove la sparsity dei coefficienti $\boldsymbol{\Xi}$ che coincide con identificare modelli dinamici semplici .

Per cui combinando insieme i quattro termini di loss insieme ai relativi iperparametri la loss complessiva é la seguente:

$$L_{tot} = L_{recon} + \lambda_1 L_{dx} + \lambda_2 L_{dz} + \lambda_3 L_{reg}$$

4 Risultati

Una delle difficoltá durante la model selection é la mancanza di una misura di accuratezza della dinamica individuata, pertanto ho dovuto considerare la la correttezza dei coefficienti e la parsimoniositá del modello dinamico individuato. Non tutti i modelli testati hanno identificato una dinamica plausibile. Il modello migliore ha individuato:

$$\begin{cases} \dot{z_3} = 0.381 z_8 \\ \dot{z_8} = -0.672 z_3 \end{cases}$$

Dove z_3 e z_8 sono due delle variabili latenti estratte dall'autoencoder e sono le maggiormente rappresentative della dinamica. Questo é dovuto al fatto che gli altri coefficienti erano nulli o prossimi allo zero e quindi ho potuto trascurarli. Il modello individuato non riesce a recuperare perfettamente la dinamica iniziale del pendolo ma ne cattura correttamente la dinamica in approssimazione di angoli piccoli (modello linearizzato).

5 Possibili sviluppi futuri

- Estendere ad altri sistemi dinamici.
- Utilizzare un autoencoder convoluzionale in quanto mi aspetto che le features rilevanti dell'input siano locali.
- Introdurre un sistema di derivate temporali al secondo ordine e quindi provare a ricostruire direttamente $\ddot{x}$ da x.

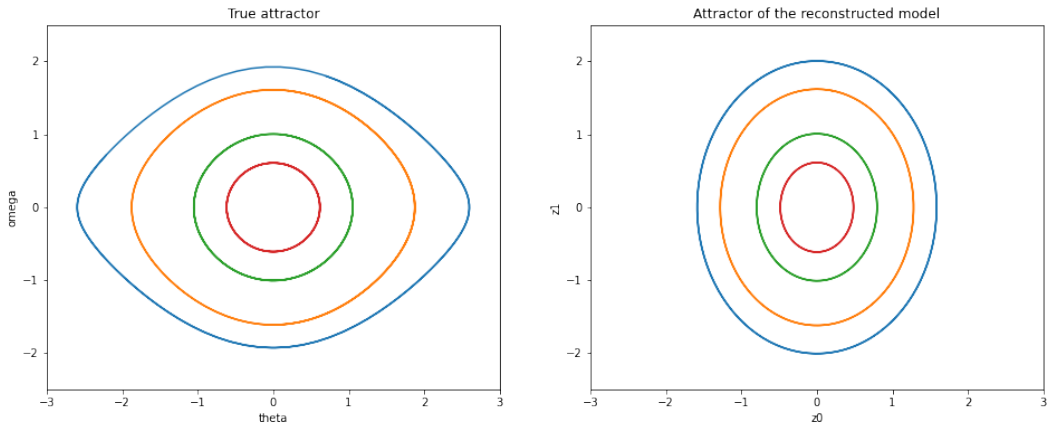


Figure 2: True and reconstructed attractor

References

[1] PyTorch documentation. `https://pytorch.org/docs/stable/index.html`.

[2] Kathleen Champion, Bethany Lusch, J. Nathan Kutz, and Steven L. Brunton. Data-driven discovery of coordinates and governing equations. 2019.

[3] Alan A. Kaptanoglu, Brian M. de Silva, Urban Fasel, Kadierdan Kaheman, Jared L. Callaham, Charles B. Delahunt, Kathleen Champion, Jean-Christophe Loiseau, J. Nathan Kutz, and Steven L. Brunton. Pysindy: A comprehensive python package for robust sparse system identification. *arXiv preprint arXiv:2111.08481*, 2021.

6 Codice

Implementazione del codice su `https://github.com/pietro-sillano/SindyPendulum`.

7 Appendice

7.1 Creazione del dataset sintetico

Ricordando l'equazione del moto di un pendolo semplice:

$$\ddot{\theta} = -\sin(\theta)$$

la posso riscrivere come un sistema di due ODE del primo ordine, ossia:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \omega \\ \dot{\omega} = -\sin(\theta) \end{cases}$$

con condizioni iniziali θ_0 e ω_0 scelte arbitrariamente. Ho integrato numericamente questo sistema da $t = 0$ a $t = 5$ con un integratore RK4 (Runge-Kutta del 4^o ordine) con un timestep $dt = 0.05$. Successivamente per generare il video del pendolo ho valutato una funzione gaussiana 2D su una griglia di 51 x 51 punti.

$$G(x, y, \theta(t)) = \exp(-A[(x - \cos\theta(t))^2 + (y - \sin\theta(t))^2])$$

In questo modo é possibile generare quanti samples sono necessari. É importante peró variare le condizioni iniziali in modo che la rete possa avere samples del sistema in ogni punto della dinamica.

7.2 Propagazione delle derivate temporali

Nella funzione di loss compaiono delle derivate temporali di alcune grandezze: $\dot{x}$ assumiamo di poterla calcolare a partire dai dati di input, mentre $\dot{z}$ e $\dot{\tilde{x}}$ dobbiamo esprimerle in funzione di grandezze note. Per esempio, per $\dot{z}$:

- m numero di layer nella rete,
- x = input,
- z = output della rete,
- $I_j = (w_j a_{j-1} + b_j)$ valore dei neuroni layer j, per cui $\boxed{I_0 = (x\omega_0 + b_0)}$ e $\boxed{z = I_m = (a_{m-1}\omega_m + b_m)}$
- $a_j(z) = f(I_j)$ attivazione del layer l,

$$\frac{dz}{dt} = \frac{dI_m}{dt} = \frac{dI_m}{da_{m-1}} \frac{da_{m-1}}{dt} \tag{4}$$

$$\frac{dI_m}{dt} = \frac{da_{m-1}}{dt} \left[\frac{d}{da_{m-1}} (a_{m-1}\omega_m + b_m) \right] \tag{5}$$

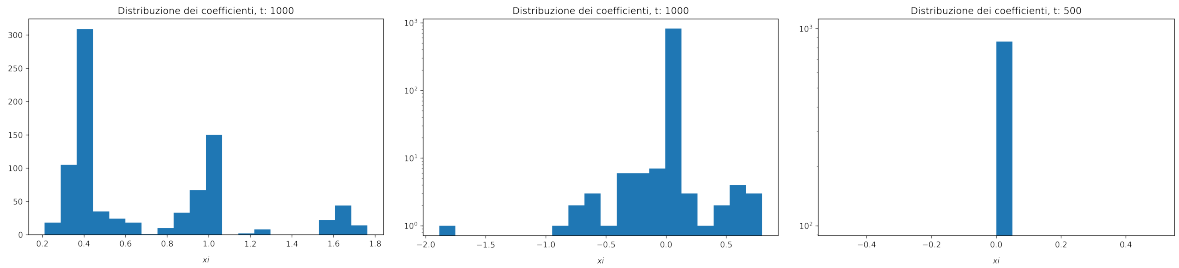
$$\frac{dI_m}{dt} = \frac{df(I_{m-1})}{dt} \omega_m \tag{6}$$

$$\boxed{\frac{dI_m}{dt} = f' \frac{d(I_{m-1})}{dt} \omega_m} \tag{7}$$

Con condizioni al contorno date dal primo layer e dall'input:

$$\boxed{\frac{dI_0}{dt} = \frac{dI_0}{dx} \frac{dx}{dt} = \dot{x}\, \omega_0} \tag{8}$$

Applicando questa regola é possibile calcolare rispettivamente $\dot{z}$ e $\dot{\tilde{x}}$, conoscendo $\dot{x}$ e $\dot{\tilde{z}}$ (per quest'ultima utilizzando la relazione $\dot{z} = \Theta(z)\Xi$).



(a) $\lambda_3 = 0$ (b) $\lambda_3 = 1 \times 10^{-5}$ (c) $\lambda_3 = 1 \times 10^{-3}$

7.3 Dettagli Training

Ho sperimentato diverse combinazioni variando la funzione di attivazione, la dimensione dello spazio latente, l'algoritmo di ottimizzazione e l'inizializzazione dei pesi. Riporto i dettagli che hanno condotto al risultato migliore:

- Funzione di attivazione f = ReLU per evitare fenomeni di **Vanishing Gradient**
- Optimizer = SGD (Stochastic Gradient Descent).
- Inizializzazione uniforme dei pesi della rete .
- I coefficienti ξ sono stati inizializzati a 1.
- Per la scelta degli iperparametri λ nella loss function ho usato i valori indicati nel paper, rispettivamente: $\lambda_1 = 5 \times 10^{-4}$, $\lambda_2 = 5 \times 10^{-5}$. Mentre per λ_3 ho svolto alcuni test.
- Dimensione dello spazio latente $d = 10$.
- Il training é durato 1500 epoche (Early Stopping)
- Batch size = 1024 samples.
- Non ho utilizzato un validation set in quanto non aggiungeva informazioni rilevanti.

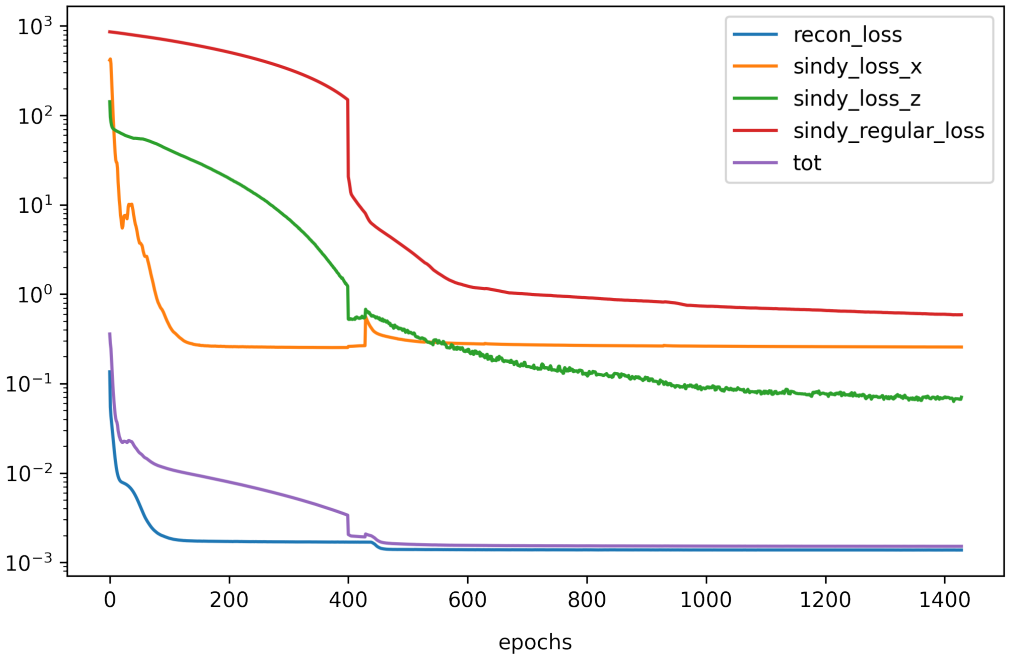


Figure 4: Loss Functions with $\lambda_3 = 1 \times 10^{-5}$