Разработка программного модуля для идентификации уравнений движения агентов многоагентной системы инструментами физически обоснованного искусственного интеллекта

Докладчик: Гущина Алёна Витальевна

Tg: @Sharova_Alyona

Mail : a1y0nka@mail.ru

Обо мне

Бакалавриат ММФ НГУ с отличием,
численное исследование спектров дифференциального оператора H-C,
4 конференции,
3 рукописи в сборниках тезисов.

Магистратура ФТИИ ИТМО с отличием,
исследование влияния методов прогнозирования значения параметра интенсивности эпидемиологической модели на ее прогноз,
идентификация систем ОДУ по кинематическим данным и их решение PINN,
1 статья WoS, Scopus,
1 конференция,
1 регистрация программы для ЭВМ,
1 принятый pull request в open-source проект.

Хакатон TECHNOHACK от ПИШ НГУ,
ускорение гидродинамического солвера с помощью JAX

Студкемп по NLP от Яндекс.Образования,
поиск антиколлизий в тексте с помощью RAG

Реализация ассистента по работе с БД с использованием LangChain и LangGraph.

https://github.com/20saaa02

Актуальность темы и научная новизна

Актуальность:

Рой самоходных роботов способен коллективно решить задачу при низкой стоимости отдельных агентов, высокой надежности и масштабируемости. Прежде требуется построение математических моделей их динамики.



Объект исследования:

Динамика роя из 30 самовращающихся вибрационных роботов в круглой арене.

Проблема:

Отсутствие априорной математической модели и физических знаний о динамике системы.

Предмет исследования:

Методы и алгоритмы идентификации математических моделей движения роботов по кинематическим данным.



Исследуемые характеристики:
Интерпретируемость, точность, устойчивость и скорость идентификации и решения систем ОДУ

Цель и задачи

Цель исследования:
разработать программный модуль для идентификации математических моделей движения агентов многоагентной системы в символьной форме на основе кинематических данных, в частности с учетом физических априорных знаний и взаимодействий.

Задачи:

1. Анализ данных и инструментов;
2. Разработка программы и настройка гиперпараметров;
3. Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости
4. Учет взаимодействия роботов;
5. Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.

Структура презентации соответствует задачам.

Задача

1. **Анализ данных и инструментов;**
2. Разработка программы и настройка гиперпараметров;
3. Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости;
4. Учет взаимодействия роботов;
5. Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.

Обзор существующих исследований

Авторы платформы Swarmodroid [1] вычислили характеристики коллективных свойств.
Однако это не позволяет моделировать динамику системы.

В [2] предложен метод разреженной регрессии SINDy для поиска коэффициентов уравнений. Однако множество термов ограничено и предопределено.

Авторы [3] создали инструмент PySR для идентификации уравнений с помощью символьной регрессии.
Однако системы содержат много слагаемых.

EPDE [4] — инструмент, объединивший два метода и компенсировавший их недостатки.
EPDE содержит PINN-подобный решатель TEDEouS [5].
Однако отсутствует опыт его применения к экспериментальны данным, требуется настройка гиперпараметров.

Методологические и теоретические основы исследования

Методы:

Symbolic / Sparse Regression;

Physics-Informed Neural Networks;

Hyperparameter Optimization;

Differential Evolution;

Discrete Fourier Transform;

K-Means clustering.

Инструменты:

NumPy, Pandas;

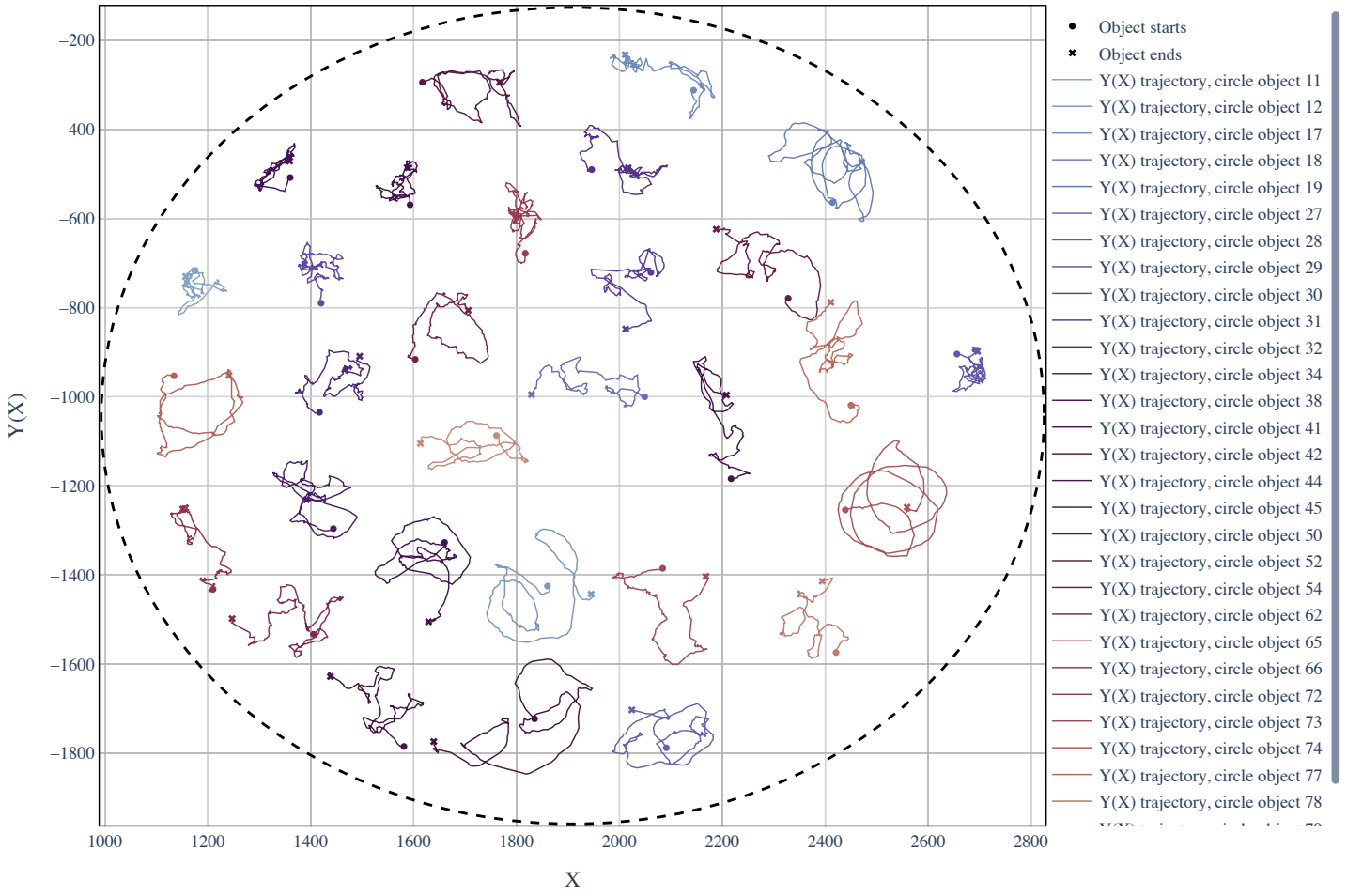
Scikit-learn;

EPDE, TEDEouS;

Optuna;

Matplotlib и Seaborn.

Данные: кинематика роботов.



Задача

1. Анализ данных и инструментов;
2. **Разработка программы и настройка гиперпараметров;**
3. Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости;
4. Учет взаимодействия роботов;
5. Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.

Ход решения. Схема внедрения инструментов.

$$\{x_{t_j}, y_{t_j}\}_{j=1}^{T}$$

EPDE ← Факторы: $x, y, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2x}{dt^2}, \frac{d^2y}{dt^2}, t, \sin t, \cos t$

$$\begin{cases} L[x](t), \\ L[y](t). \end{cases} \quad \vec{f} = [Q_{1,x}, Q_{1,y}, Q_{2,x}, Q_{2,y}]$$

(Q_1, Q_2 характеризуют точность дифференциального оператора и стабильность его коэффициентов.)

TEDEouS ← Граничные условия Дирихле

$$\{\hat{x}_{t_j}, \hat{y}_{t_j}\}_{j=1}^{T}$$

Ход решения. Автоподбор гиперпараметров.

EPDE

Гиперпараметр	Значение
sigma	{0,2,3,4,5}
poly_window	{5,7,9,11}
population_size	{4,6,8,10,12,14}

TEDEouS

Гиперпараметр	Значение
L	[0;2]
M	{1,2,3,4,5,6}
num_layers	{1,2,3,4,5}

Целевая функция:

$$\min_i(Q_{1,x} + Q_{1,y} + \lambda \cdot \mathbb{I}((Q_{2,x} + Q_{2,y}) > 0.1 \cdot 2)),$$

$$i \in \mathbb{N}, i \leq \text{population_size}$$

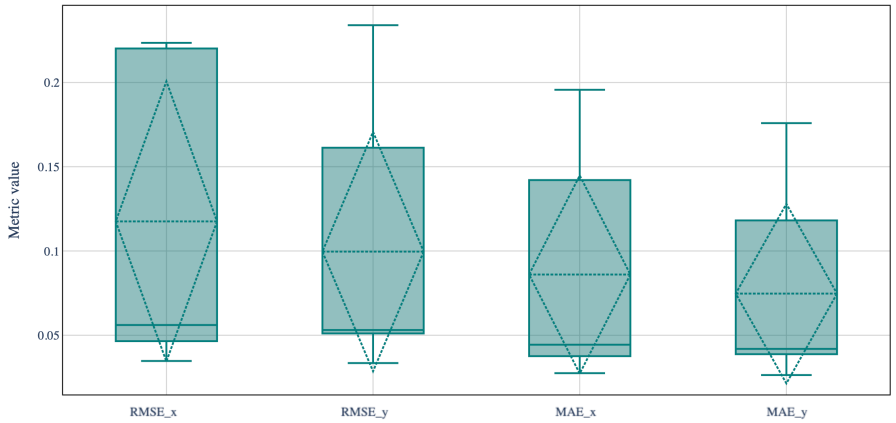
Выбранная целевая функция:

$$MAPE_x + MAPE_y + RMSE_{norm}$$

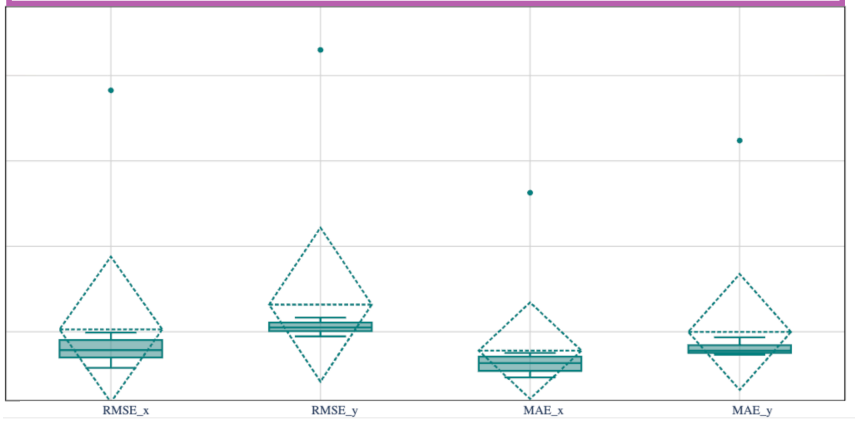
Повышение точности в 2 раза.

$$MAPE_x = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{x_i - \hat{x}_i}{x_i}\right| \cdot 100\,\%$$

$$RMSE_{norm} = \frac{1}{\sigma(x,y)}\sqrt{\frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}((\hat{x}_i - x_i)^2 + (\hat{y}_i - y_i)^2)} \cdot 100\,\%$$

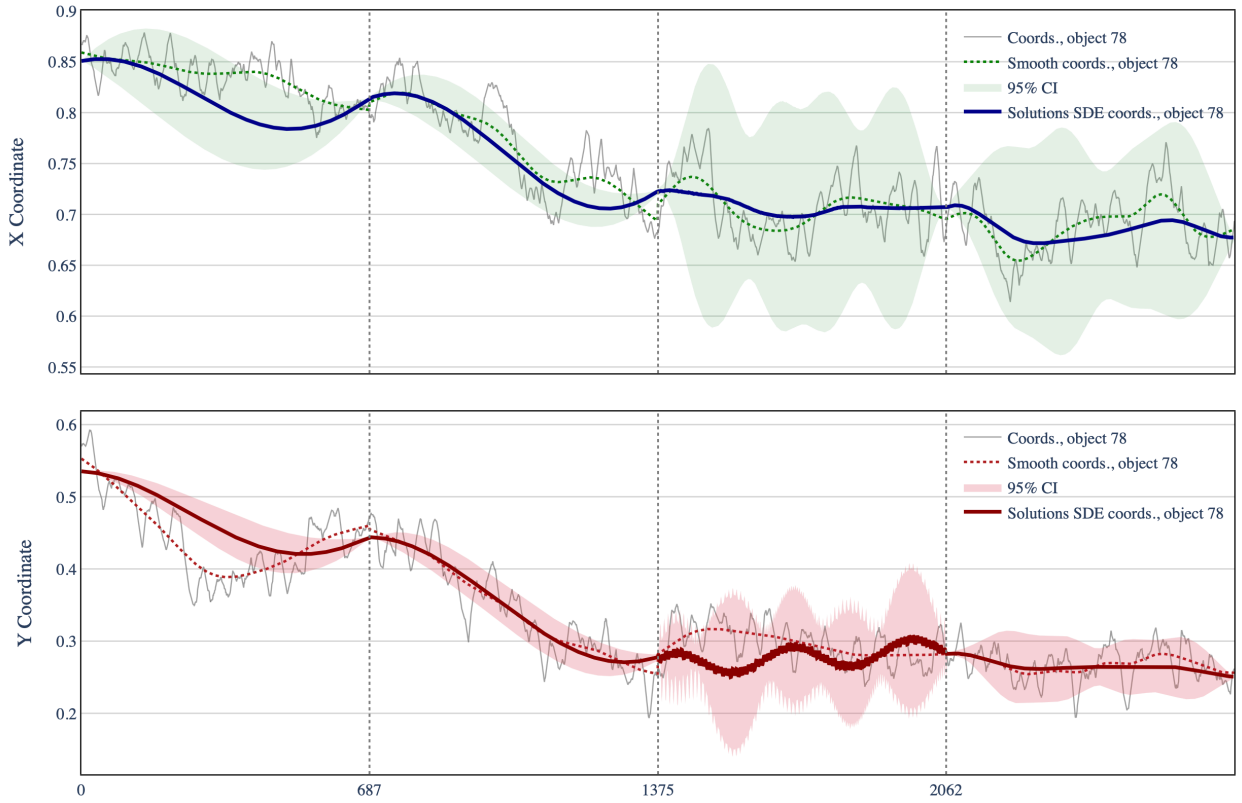


$RMSE$

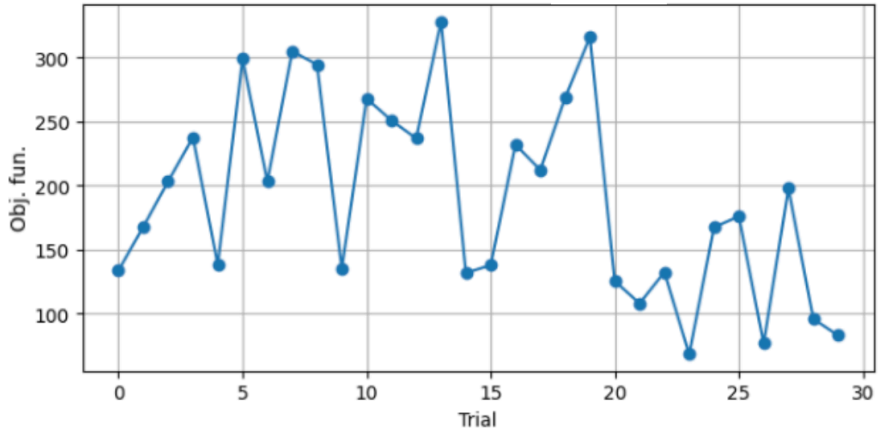


$MAPE_x + MAPE_y + RMSE_{norm}$

Результаты. Автоподбор гиперпараметров.



	Было	Стало
Trials	1	30
Количество эпох	150; 1500	150*30; 1500
Время реконструкции, мин.	10; 50	130; 50
Значение целевой функции	270; 232	68; 57
L	1.73	0.74
M	4	1
num_layers	4	4



Ускорение в 10 раз, повышение точности — в 4.
Разброс значений целевой функции — от 50 до 330.

Задача

1. Анализ данных и инструментов;
2. Разработка программы и настройка гиперпараметров;
3. **Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости;**
4. Учет взаимодействия роботов;
5. Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.

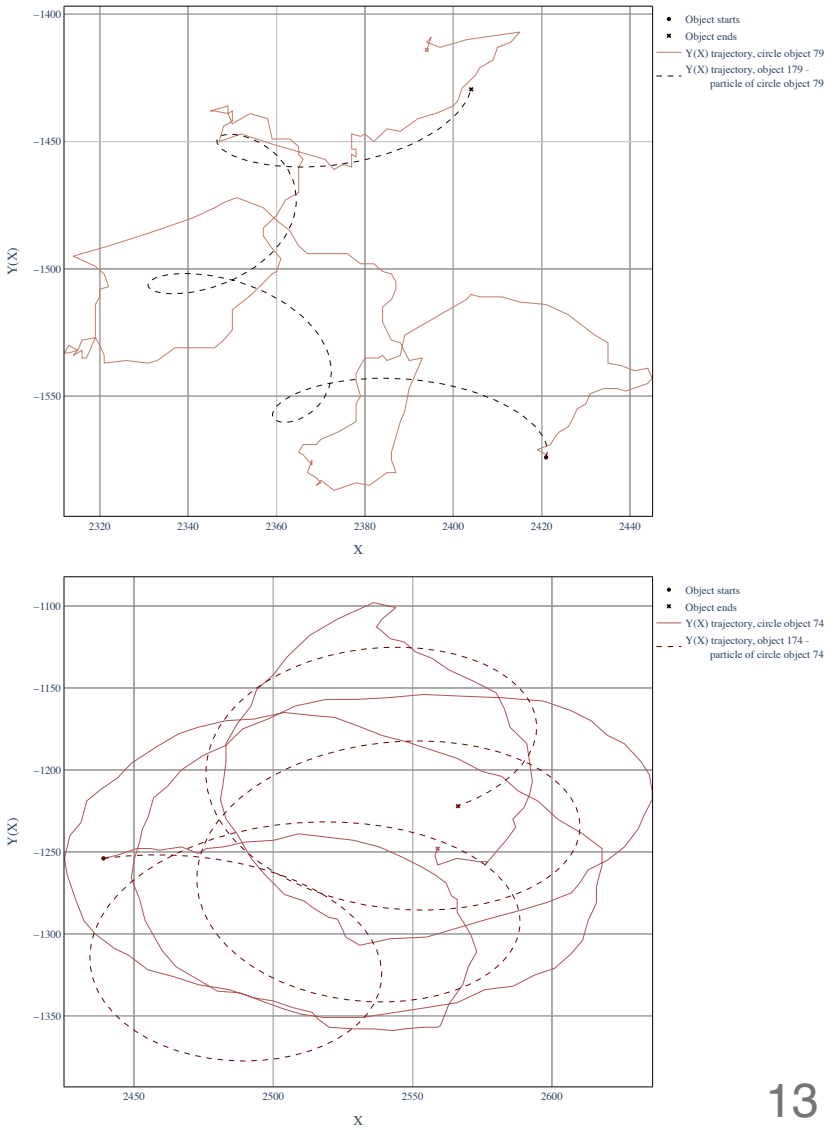
Ход решения. Физически обоснованная аппроксимация.

$$\begin{cases} m\vec{\hat{r}}'' = q\overrightarrow{E(t)} + q[\vec{r}' \times \vec{B}], \\ \vec{\hat{r}}(0) = \vec{r_0}, \\ \vec{\hat{r}}'(0) = \vec{r_1}, \end{cases}$$

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \quad \vec{E}(t) = \begin{pmatrix} sign(E_{0x})\,|\vec{E_0}| * cos(\Omega(\omega)t + \phi) \\ sign(E_{0y})\,|\vec{E_0}| * sin(\Omega(\omega)t + \phi) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{E_0} = \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\omega = \frac{qB}{m} \quad \Omega(\omega) = k \cdot \omega \quad \phi = arctg(\frac{|E_{0y}|}{|E_{0x}|})$$

$$\vec{r_0} = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{r_1} = \begin{pmatrix} \bar{u}_0 \\ \bar{v}_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad q = 1.2 \quad m = 60$$



Результаты. Физически обоснованная аппроксимация.

Робот 74

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} \cdot x = a_1 \frac{\partial x}{\partial t} + b_1 y + c_1, \\ x \cdot \frac{\partial y}{\partial t} = a_2 \frac{\partial y}{\partial t} + b_2 x + c_2, \end{cases}$$

Робот 79

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \cdot y = a_1 \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + b_1 x + d_1 \\ \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \cdot y = a_2 \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + b_2 y + c_2 t \cdot x + d_2 \end{cases}$$

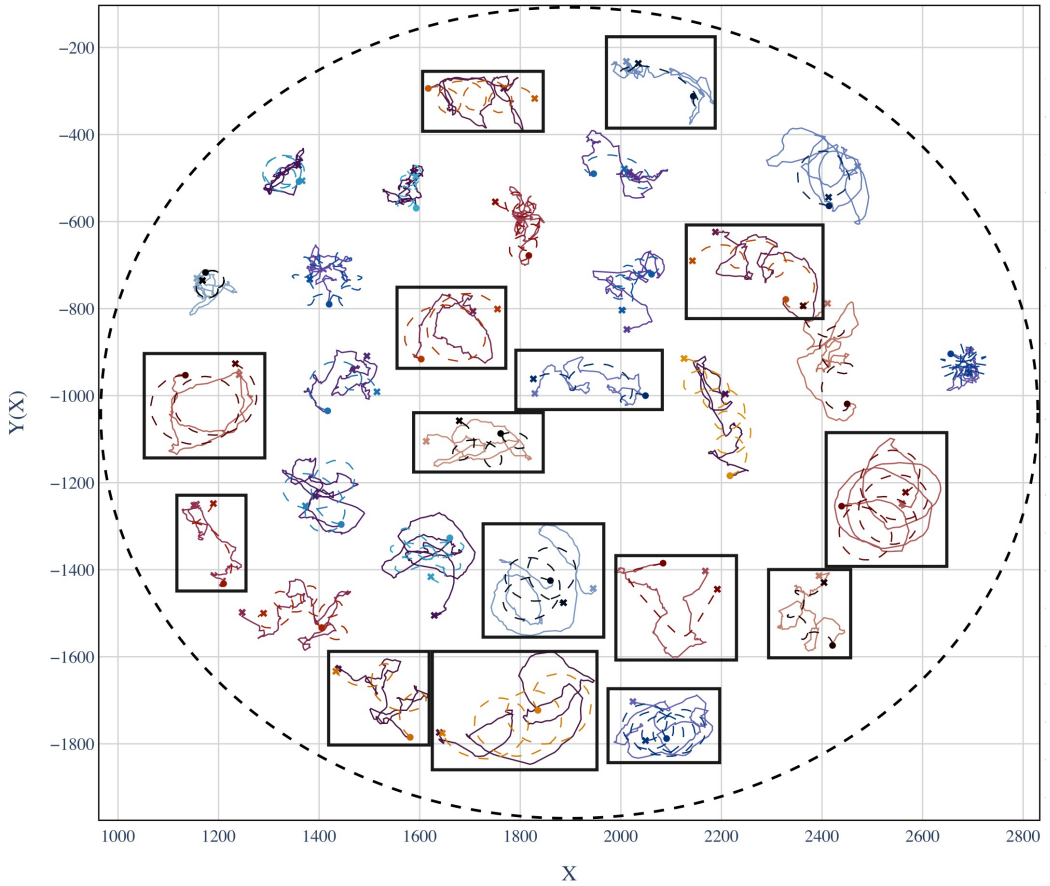
Частица 174

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = a_1 \frac{\partial y}{\partial t} + b_1, \\ \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = a_2 \frac{\partial x}{\partial t} + b_2 . \end{cases}$$

Частица 179

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = a_1 \frac{\partial y}{\partial t} \cdot x + c_1 \\ \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = a_2 \frac{\partial x}{\partial t} + b_2 y + c_2 \end{cases}$$

Id	$Q_{1,x}$	$Q_{1,y}$	$Q_{2,x}$	$Q_{2,y}$
74	$3.09 \cdot 10^{-2}$	$2.89 \cdot 10^{-2}$	$4.22 \cdot 10^{-1}$	$2.06 \cdot 10^{-1}$
174	$0.98 \cdot 10^{-2}$	$1.61 \cdot 10^{-2}$	$0.88 \cdot 10^{-6}$	$2.34 \cdot 10^{-6}$
79	$4.17 \cdot 10^{-2}$	$4.14 \cdot 10^{-2}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$	$1.81 \cdot 10^{-1}$
179	$3.91 \cdot 10^{-2}$	$0.89 \cdot 10^{-2}$	$0.40 \cdot 10^{-4}$	$1.91 \cdot 10^{-4}$



- Успешная калибровка для более половины.
- Восстановление вращательной динамики частицы.
- Упрощение структуры.
- Повышение точности в 3 раза, стабильности — в 10000.

Задача

1. Анализ данных и инструментов;
2. Разработка программы и настройка гиперпараметров;
3. Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости;
4. **Учет взаимодействия роботов;**
5. Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.

Ход решения. Учет взаимодействия.

Индивидуальный подход:

$$\{x_{t_j}, y_{t_j}\}_{j=1}^{T}$$

EPDE

$$\begin{cases} L[x](t), \\ L[y](t). \end{cases} \quad \vec{f}^T = \begin{bmatrix} Q_{1,x}, \\ Q_{1,y}, \\ Q_{2,x}, \\ Q_{2,y}] \end{bmatrix}$$

Коллективный подход:

$$\{\{x_{1,t_j}, y_{1,t_j}\}_{j=1}^{T}, \ldots, \{x_{n,t_j}, y_{n,t_j}\}_{j=1}^{T}\}$$

EPDE

$$\begin{cases} L[x_1](t), \\ L[y_1](t), \\ \cdots \\ L[x_n](t), \\ L[y_n](t). \end{cases} \quad \vec{f}^T = \begin{bmatrix} Q_{1,x_1}, \\ Q_{1,y_1}, \\ \cdots, \\ Q_{1,x_n}, \\ Q_{1,y_n}, \\ Q_{2,x_1}, \\ Q_{2,y_1}, \\ \cdots, \\ Q_{2,x_n}, \\ Q_{2,y_n} \end{bmatrix}$$

Результат. Учет взаимодействия.

Роботы 74 и 79

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{dt} = -9.713 \cdot 10^{-2} y_1 + 6.111 \cdot 10^{-2}, \\ x_1 \dfrac{d^2 y_1}{dt^2} = -1.217 \cdot 10^{-3} y_1 + 8.159 \cdot 10^{-1} \dfrac{d^2 y_1}{dt^2} + 7.609 \cdot 10^{-4}, \\ y_2 \dfrac{d^2 x_2}{dt^2} = -5.474 \cdot 10^{-4} x_2 + 7.589 \cdot 10^{-1} \dfrac{d^2 x_2}{dt^2} - 9.474 \cdot 10^{-5} x_1 + 5.143 \cdot 10^{-4}, \\ \dfrac{dy_2}{dt} = -6.338 \cdot 10^{-2} x_2 + 4.943 \cdot 10^{-2}. \end{cases}$$

Индивидуальный подход:

Id	$Q_{1,x}$	$Q_{1,y}$	$Q_{2,x}$	$Q_{2,y}$
74	$3.09 \cdot 10^{-2}$	$2.89 \cdot 10^{-2}$	$4.22 \cdot 10^{-1}$	$2.06 \cdot 10^{-1}$
79	$4.17 \cdot 10^{-2}$	$4.14 \cdot 10^{-2}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$	$1.81 \cdot 10^{-1}$

Повышение стабильности в 9 раз, уменьшение точность — в 6.

Ухудшение интерпретируемости.

Коллективный подход:

Id	Q_{1,x_1}	Q_{1,y_1}	Q_{1,x_2}	Q_{1,y_2}	Q_{2,x_1}	Q_{2,y_1}	Q_{2,x_2}	Q_{2,y_2}
74, 79	$59.82 \cdot 10^{-2}$	$7.68 \cdot 10^{-2}$	$5.83 \cdot 10^{-2}$	$90.84 \cdot 10^{-2}$	$0.13 \cdot 10^{-1}$	$1.16 \cdot 10^{-1}$	$4.68 \cdot 10^{-1}$	$0.55 \cdot 10^{-1}$

Задача

1. Анализ данных и инструментов;
2. Разработка программы и настройка гиперпараметров;
3. Физически обоснованная аппроксимация и оценка ее применимости;
4. Учет взаимодействия роботов;
5. **Кластеризация агентов, сравнительный анализ подходов.**

Ход решения. Кластеризация.

Типы признаков:

1. Параметры модели движения заряженной частицы в ЭМП:

$$\omega, \Omega, \phi, B, |\overrightarrow{E_0}|, E_{0x}, E_{0y}, \text{particle_successfull}$$

2. Частотные характеристики дискретного преобразование Фурье:

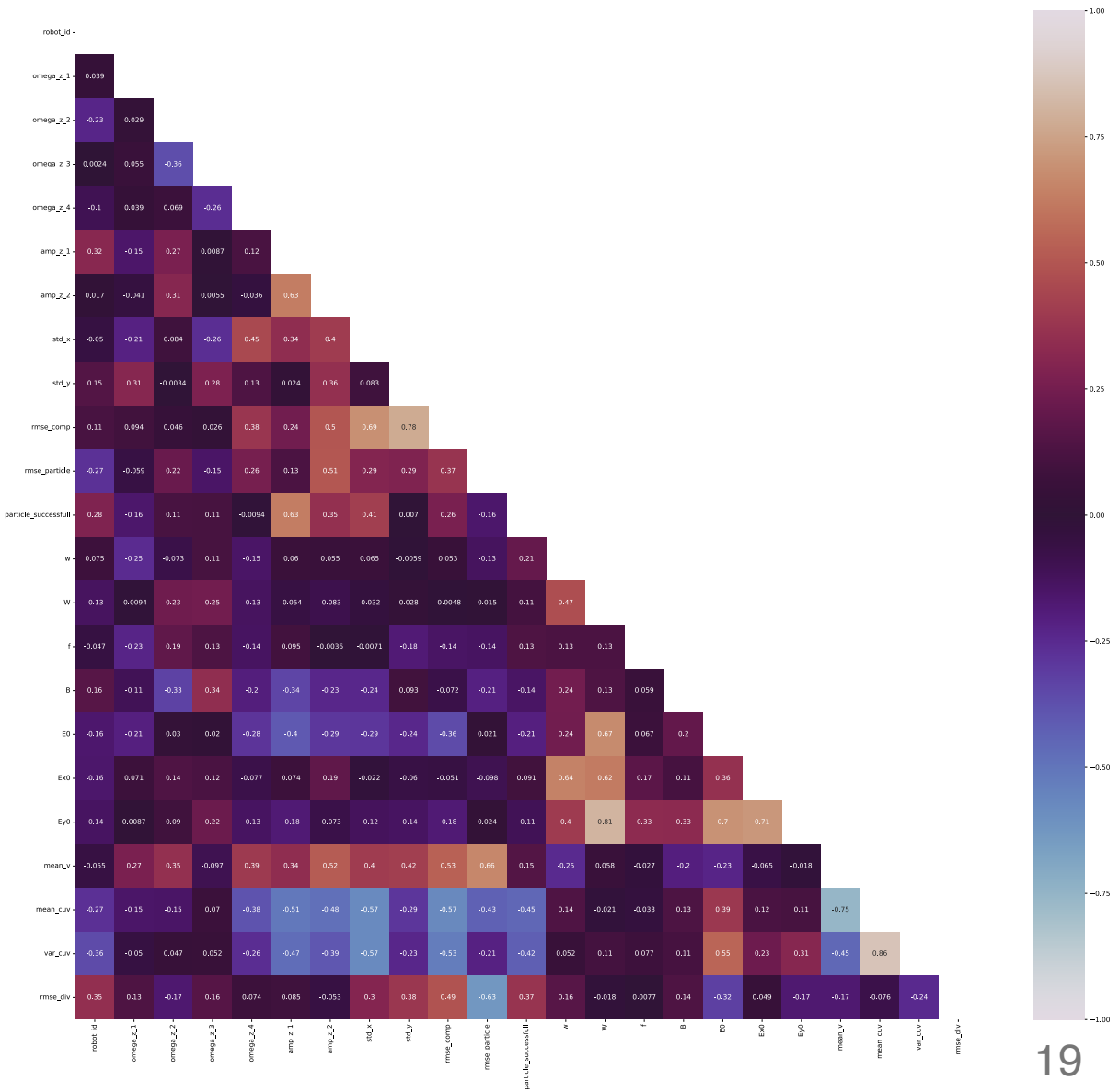
$$Z_k = \sum_{j=0}^{T-1} z_j \exp(-\frac{i \cdot 2\pi k \cdot j}{T}), k = 0,...,T-1,$$

$$\hat{z}_j = \sum_{k=0}^{3} A_j \exp(i \cdot (\omega_k j - \phi_k)), j \in \{0,...,T-1\}$$

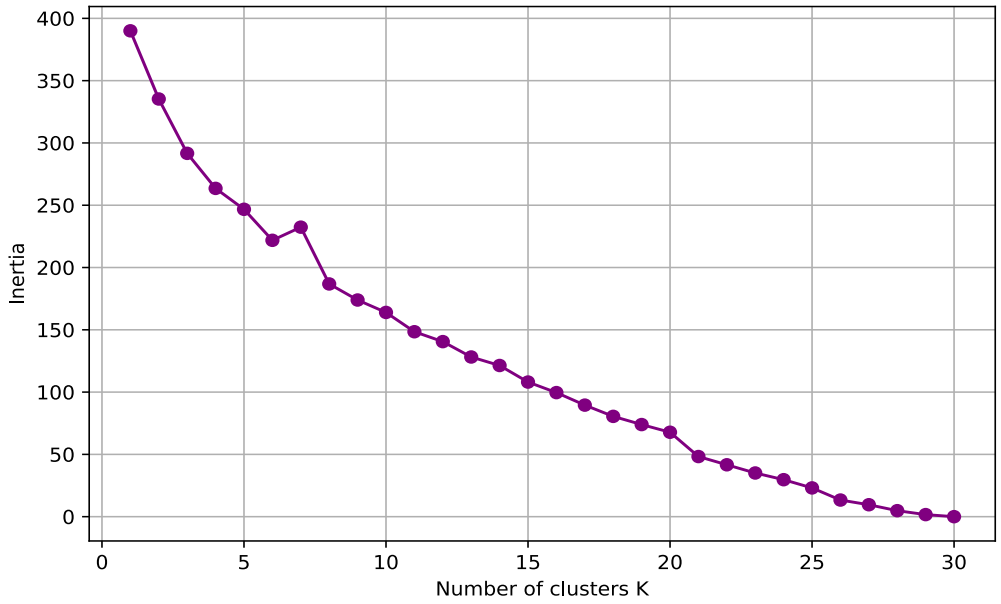
$$A_k, \phi_k, \omega_k, \sigma(x - \hat{x}), \sigma(y - \hat{y})$$

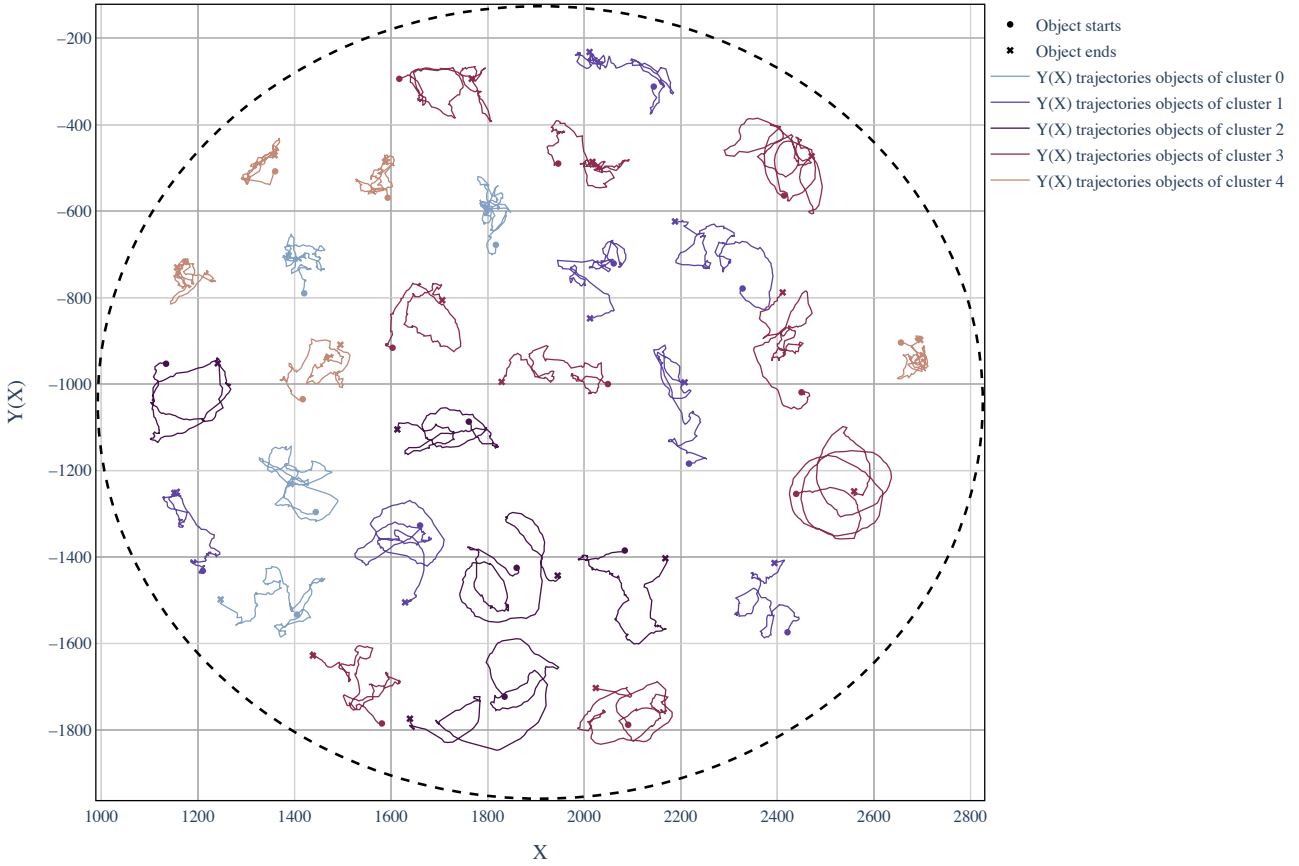
3. Кинематика

$$\overline{v}, \overline{k}, \text{Var}(k)$$



Результат. Кластеризация





Оптимальное число кластеров — 5.

Результат. Сравнение подходов.

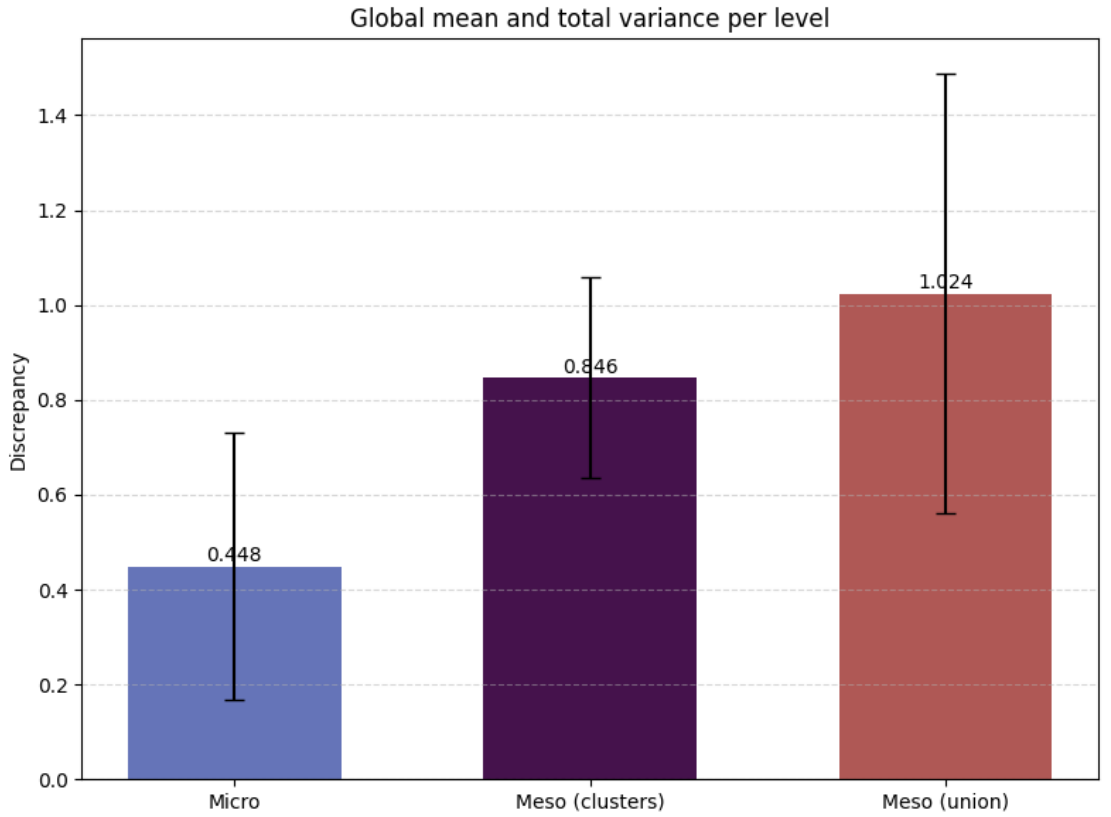
$$Q_1^{r,s} = \frac{Q_{1,x}^{r,s} + Q_{1,y}^{r,s}}{2}$$

$$\overline{Q}_1^r = \frac{1}{n_r}\sum_{s=1}^{n_r} Q_1^{r,s}, \quad (\sigma^r)^2 = \frac{1}{n_r}\sum_{s=1}^{n_r}(Q_1^{r,s} - \overline{Q}_1^r)^2$$

$$\overline{Q}_1 = \frac{\sum_{r=1}^{30} n_r \overline{Q}_1^r}{\sum_{r=1}^{30} n_r}$$

$$(\sigma_{between})^2 = \frac{\sum_{r=1}^{30} n_r(\overline{Q}_1^r - \overline{Q}_1)^2}{\sum_{r=1}^{30} n_r} \quad (\sigma_{within})^2 = \frac{\sum_{r=1}^{30} n_r(\sigma^r)^2}{\sum_{r=1}^{30} n_r}$$

$$(\sigma_{total})^2 = (\sigma_{within})^2 + (\sigma_{between})^2$$



Подход	Время, мин.
Mirco	147
Meso (union)	948
Meso (clusters)	178

Индивидуальный — точный и быстрый.
Коллективно-общий — долгий, неинтерпретируемый.
Коллективно-кластерный — компромисс.

Заключение

Разработан программный модуль https://github.com/20saaa02/Active_Matter

Автоматический подбор выявленных гиперпараметров сократил время реконструкции траекторий в 10 раз с увеличение точности в 4.

Физически обоснованная аппроксимация данных в индивидуальном подходе упростила структур систем ОДУ, увеличила точность в 3 раза, устойчивость в — 10000.

Учет взаимодействий двух роботов повысил устойчивость в 9 раз, но понизил точность — в 6, интерпретируемость.

Собранный набор признаков содержал кинематические характеристики траекторий агентов и частотные — траектрий частиц и быстрого преобразования Фурье.
Оптимальное число кластеров — 5.

Индивидуальный подход показал в среднем наибольшую точность за меньшее время.
Коллективно-кластерный стал компромиссом между точностью и возможностью учесть взаимодействия почти за то же время.
Коллективно-общий требует в 6 раз больше времени при наименьших точности и интерпретируемости.

Разработанный алгоритм идентификации систем ОДУ применим к роботам овальной формы.

Автоматического подбора гиперпараметров EPDE включен в официальный репозиторий через Pull Request.

Цель достигнута!

Развитие работы

Определить метрику, характеризующую качество калибровки модели с помощью порогового значения;

Модифицировать модель движения заряженной частицы в ЭМП для физически обоснованной аппроксимации коллективной динамики роботов.

Исследовать влияние порогового значение корреляции на качество совместной идентификации моделей для кластеров.

Найти модель для физически обоснованной апроксимации траекторий роботов овальной формы;

Применить алгоритм для идентификации моделей движения заряженных частиц в TPC детектора MPD на NICA и реконструкции треков.

Создать автопарсер полученных уравнений для передачи в TEDEouS;

Улучшить сходимость реконструкций с помощью модификации целевой функции Optuna для TEDEouS.

Перейти к идентификации систем ДУ в частных производных или стохастических ДУ.

Спасибо
за внимание!

ITMO more than a UNIVERSITY