



Kauno technologijos universitetas
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Netiesinių dinaminių sistemų išretintoji identifikacija defektų nustatymui

Baigiamasis magistro studijų projektas

Algirdas Kazlauskas
Projekto autorius

Prof. habil. dr. Minvydas Kazys Ragulskis
Vadovas



Kauno technologijos universitetas
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Netiesinių dinaminų sistemų išretintoji identifikacija defektų nustatymui

Baigiamasis magistro studijų projektas
Taikomoji matematika (6211AX006)

Algirdas Kazlauskas

Projekto autorius

Prof. habil. dr. Minvydas Kazys Ragulskis

Vadovas

Doc. dr. Mantas Landauskas

Recenzentas



Kauno technologijos universitetas

Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Algirdas Kazlauskas

Netiesinių dinaminų sistemų išretintoji identifikacija defektų nustatymui

Akademinio sąžiningumo deklaracija

Patvirtinu, kad:

1. baigiamąjį projektą parengiau savarankiškai ir sąžiningai, nepažeisdama(s) kitų asmenų autoriaus ar kitų teisių, laikydamasi(s) Lietuvos Respublikos autorių teisių ir gretutinių teisių įstatymo nuostatų, Kauno technologijos universiteto (toliau – Universitetas) intelektinės nuosavybės valdymo ir perdavimo nuostatų bei Universiteto akademinės etikos kodekse nustatytų etikos reikalavimų;
2. baigiamajame projekte visi pateikti duomenys ir tyrimų rezultatai yra teisingi ir gauti teisėtai, nei viena šio projekto dalis nėra plagijuota nuo jokių spausdintinių ar elektroninių šaltinių, visos baigiamojo projekto tekste pateiktos citatos ir nuorodos yra nurodytos literatūros sąrašė;
3. įstatymų nenumatytų piniginių sumų už baigiamąjį projektą ar jo dalis niekam nesu mokėjęs (-usi);
4. suprantu, kad išaiškėjus nesąžiningumo ar kitų asmenų teisių pažeidimo faktui, man bus taikomos akademinės nuobaudos pagal Universitete galiojančią tvarką ir būsiu pašalinta(s) iš Universiteto, o baigiamasis projektas gali būti pateiktas Akademinės etikos ir procedūrų kontrolieriaus tarnybai nagrinėjant galimą akademinės etikos pažeidimą.

Algirdas Kazlauskas

Patvirtinta elektroniniu būdu

Kazlauskas Algirdas. Netiesinių dinaminių sistemų išretintoji identifikacija defektų nustatymui. Magistro studijų baigiamasis projektas / vadovas prof. Minvydas Ragulskis; Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas.

Studijų kryptis ir sritis (studijų krypčių grupė): Taikomoji matematika (Matematikos mokslai).

Reikšminiai žodžiai: mašininis mokymasis, išretintoji regresija, sistemų identifikavimas, dinaminės sistemos.

Kaunas, 2022. 30 p.

Santrauka

Paskutiniaisiais dešimtmečiais, remiantis didelėmis duomenų apimtimis bei tobulėjančiais mašininio mokymosi metodais, tapo įmanoma bent iš dalies automatizuoti netiesinių dinaminių sistemų modelių formavimo procesą. Šios metodikos galimybės buvo pademonstruotos sėkmingai identifikuojant modelius skysčių tėkmės, biologinių reakcijų dinamikos ir kitokuose uždaviniuose. Siekiant detaliau susipažinti su minėtąja metodika tiriamajame darbe pristatomas sistemos būsenos evoliucijos lygčių radimo uždavinio sprendimas naudojantis išretintosios identifikacijos algoritmu, kurio pagalba ir sudaromi modeliai, leidžiantys automatizuoti netiesinių sistemų identifikavimą. Remiantis baziniu netiesinės dinamikos išretintosios identifikacijos algoritmu (angl. *sparse identification of nonlinear dynamics*) atliekamas pavyzdinių sistemų lygčių indentifikavimas ir pateikiami tyrimo eigoje iškilusių uždavinių, susijusių su reikalavimais matavimo kintamųjų pasirinkimui, duomenų kokybei, kandidatinių narių rinkinio sudarymui bei optimizavimo parametru nustatymui, sprendimai.

Kazlauskas Algirdas. Sparse identification of nonlinear dynamics for defect detection / supervisor prof. Minvydas Ragulskis; Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Kaunas University of Technology.

Study field and area (study field group): Applied Mathematics (Mathematical Sciences).

Keywords: machine learning, sparse regression, system identification, dynamical systems.

Kaunas, 2022. 30 p.

Summary

By taking advantage of the availability of large volumes of data and advances in machine learning techniques it has become at least partially possible in recent decades to automate the process of building models for non-linear dynamical systems. The capabilities of such methodology have been demonstrated through successful model identification for fluid flow, biological reaction dynamics and other problems. In order to get a more detailed insight into this methodology current work investigates the sparse identification algorithm which allows to automate identification of system's state evolution equations. The equations for some sample systems are identified by the use of the basic algorithm form. And the issues arising from the choice of measurement variables, the choice of candidate function set, data quality and optimisation parameters are reviewed.

Turinys

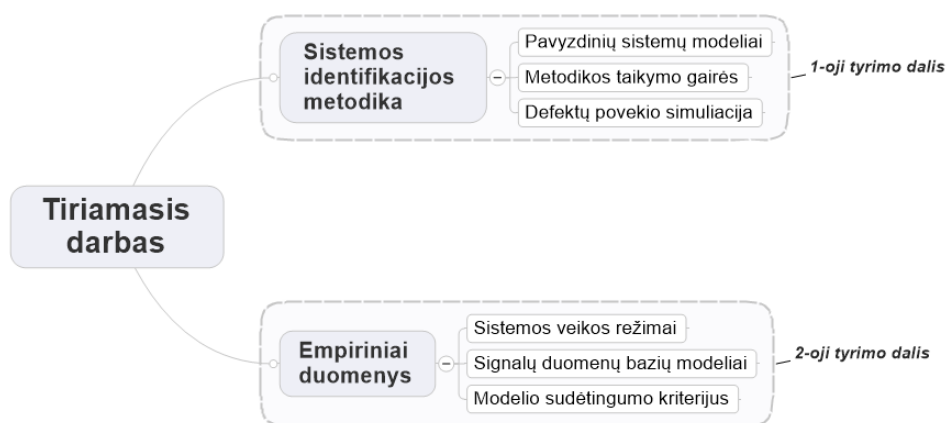
Paveikslų sąrašas	7
Įvadas	8
1. Literatūros apžvalga	9
1.1. Istorinės aplinkybės.....	9
1.2. Problemos ištakos.....	9
1.3. Problemos sprendimo būdas	10
1.4. Pasirinktos metodikos ypatybės	10
2. Tyrimo metodika	12
2.1. Modelio formuluotė.....	12
2.2. Modelio taikymo reikalavimai ir hiperparametrų modifikavimo gairės	15
2.3. Modelio programinė realizacija	17
2.4. Tyrimo prielaidos ir metodikos palyginimas	19
3. Tyrimų rezultatai	21
3.1. Analitinės sistemos normalios veikos režimo duomenys	21
3.2. Analitinės sistemos išderintos veikos režimo duomenys	24
Apibendrinimas	27
Rezultatai.....	27
Išvados.....	27
Pastebėjimai.....	27
Rekomendacijos.....	27
Literatūros sąrašas	28

Paveikslų sąrašas

1 pav. Tiriamojo darbo uždavinių struktūrinė diagrama	8
2 pav. Identifikuoto modelio išretintų koeficientų matricos reprezentacija	14
3 pav. Bazinio išretintosios identifikacijos algoritmo pseudokodas	15
4 pav. Modelio hiperparametrų įtakos sričių diagrama	17
5 pav. Programinės realizacijos paruošimo etapų diagrama	18
6 pav. Modelio atrankos programinės realizacijos schema	18
7 pav. Tiriamojo darbo prielaidų sąryšio su uždaviniais struktūrinė diagrama	19
8 pav. Tiriamos Lorencio sistemos duomenų laiko eilutės	21
9 pav. Tiriamos Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija	21
10 pav. <i>PySINDy</i> identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=0$	22
11 pav. <i>PySINDy</i> identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=0.1$	22
12 pav. <i>PySINDy</i> identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=1$	22
13 pav. Identifikuotos Lorencio sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafikas su <i>PySINDy</i> lygčių sistemų nuorodomis	222
14 pav. Identifikuotos Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija, kai $\lambda=0.1$	23
15 pav. Išderintos Lorencio sistemos duomenų laiko eilutės	24
16 pav. Išderintos Lorencio sistemos būsenos trajektorija	24
17 pav. Identifikuotos išderintos Lorencio sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafikas su <i>PySINDy</i> lygčių sistemų nuorodomis	25
18 pav. Identifikuotos išderintos ir pirminės Lorencio sistemų būsenų evoliucijos trajektorijos	26

Ivadas

Dinaminių sistemų modeliai taikomi beveik visose mokslo, inžinerijos ir socialinių mokslų srityse. Jų pagalba galime analizuoti ir prognozuoti tiriamos sistemos būsenos evoliuciją. Pastaruoju metu didėjant duomenų kiekiui išaugo ir mašininio mokymosi algoritmų įvairovė bei efektyvumas. Tobulėjant mašininio mokymosi metodams tapo įmanoma vis tiksliau automatizuotai nustatyti diferencialinių lygčių sistemos narius tiesiogiai iš duomenų. Šio tiriamojo darbo tikslas yra įsisavinti ir patikrinti konkretaus mašininio mokymosi metodo taikymą tiriant dinamines sistemas. Palyginus su kitais gerai žinomais metodais, šis – ganėtinai naujas – pirmieji jo taikymai moksliniuose straipsniuose minimi nuo 2011 m. [25]. Pasirinktoji metodika remiasi išretintosios identifikacijos (angl. *sparse identification*) algoritmu [23], kurio pagalba atliekama netiesinių dinaminių sistemų identifikacija. Tyrime priimama prielaida, jog identifikavus dinaminės sistemos modelį, vėliau galėsime ieškoti ir sistemos veikos režimus klasifikuojančio sudėtingumo kriterijaus. Pavyzdžiui, gebėdami identifikuoti elektrokardiogramos duomenų modelį, taip pat galėtume nustatyti ir ankstyvųjų ligų diagnostinį kriterijų. Remiantis tokia prielaida, šiame darbe dinaminių sistemų tyrimas tapatinamas su inžinerinių ir biologinių sistemų modelių identifikavimu, siekiant patikrinti ar jų sutrikimai bei defektai atsispindi identifikuojamame matematiname modelyje. Pirmoji tiriamojo darbo uždavinio dalis – patikrinti dinaminės sistemos automatinės identifikacijos metodiką. Ją atliksime algoritmą taikydami pasirinktų bandomųjų dinaminių sistemų identifikavimui, atskirai nagrinėdami išskylančius metodikos taikymo klausimus. Antroji uždavinio dalis – ieškoti sistemos veikos režimus klasifikuojančio sudėtingumo kriterijaus. Ši dalis formuluojama kaip atskiras tyrimas, nes sistemos charakterizavimas atliekamas remiantis konkrečios tyrimų srities žiniomis, ne vien pasirinktais analizės metodais. Todėl, priklausomai nuo pirmosios uždavinio dalies išskylančių užduočių atlikimo progreso ir projektui skirto bendro laiko, pastaroji dalis iš anksto numatoma sekančiam, po šio tiriamojo darbo užbaigimo, tyrimui. Žemiau pateikiama numatyta tiriamojo darbo uždavinių struktūrinė diagrama.



1 pav. Tiriamojo darbo uždavinių struktūrinė diagrama

1. Literatūros apžvalga

1.1. Istorinės aplinkybės

Šimtmečiais mokslininkai bandė nustatyti ir užfiksuoti analitinius dėsnius, kuriais grindžiami fizikiniai gamtos reiškiniai. Gebėjimas išvesti fizikinius principus ir įvairius dėsningumus aprašančiąsias lygtis buvo esmine žmonijos istorijos mokslinių atradimų ir technologinės pažangos priežastimi. Pagrindinis fizikos ir, apskritai kalbant, mokslo tikslas yra atrasti matematinius dėsningumus duomenyse. Tačiau įprasta, jog net kai duomenų turime pakankamai, dėsningumai ir juos aprašantys modeliai dažnai lieka vis vien neatpažįstamais. Pavyzdžiui, C. Ptolemėjus remdamasis empiriniais stebėjimais sukūrė savo planetų judėjimo teoriją, kurioje apibrėžė planetų judėjimo suskirstymą į apskritimų hierarchiją [1]. Vėliau, J. Kepleris, daugelį metų analizavęs T. Brahe'ės astronominių duomenų lenteles apie planetų orbitas, nustatė, kad Marso orbita yra elipsė. Šis atradimas sukėlė mokslinę revoliuciją, nustačiusią planetų judėjimo dėsnių pagrindus, kuriais remiantis prognozės dar geriau atitiko turimus duomenis [2]. Galiausiai, Keplerio teorija paskatino I. Newton'as sukurti antrąjį judėjimo dėsnį, kuris suteikė universalų, apibendrinamą ir glaustą fizikinės dinamikos aprašymą [3]. Remiantis Niutono dinamikos modeliais buvo pasiekta daug įvairių technologinių patobulinimų ir mokslinių spėjimų. O šiuolaikinė dinaminių sistemų teorija prasidėjo nuo H. Poincaré'ės darbų būtent apie planetų judėjimo chaotiškumą [4]. Apibendrintai kalbant, dinaminės sistemos suteikia matematinę sąrangą, skirtą aprašyti mus supantį pasaulį laike besikeičiančių dydžių tarpusavio sąveikos modelių pagalba. O formaliai įvardinant, dinaminės sistemos taikomos analizuojant ir prognozuojant diferencialinių lygčių sistemų arba iteracinių vaizdavimų apibūdinamą tiriamos sistemos būsenos evoliuciją. Ši formuluotė apima reiškinius, stebimus klasikinėje mechaninėse sistemose, elektros grandinėse, finansuose, neurobiologijoje, epidemiologijoje, klimato moksle ir kitose laike besivystančiose sistemose.

1.2. Problemos ištakos

Baigtiniai algebriniai modeliai puikiai dera mokslinių tyrimų užklausų formavimui, nes algebrinės išraiškos paprastai yra glaustos, apibendrinamos ir gali būti aiškiai interpretuojamos. Tačiau pagrindine problema yra tai, jog šias išraiškas sunku rasti, nustatyti. Bendru atveju gamtos dėsnių paieška yra susijusi su matematinių invariantų ir simetrijos atpažinimo uždaviniais, todėl beveik visų gamtos fizikinių dėsnių pagrindu galime laikyti invariantines algebrines lygtis [5]. Nors užduotis atrasti ir apibrėžti matematinius invariantus taip pat yra sudėtinga, tačiau remiantis šia perspektyva jau galime tiksliau formuluoti problematiką. Naudojantis ankstesniu pavyzdžiu, galime teigti, kad Kepleris, turėdamas išsamiausių ir tiksliausių to meto duomenis apie planetas, sukūrė duomenimis paremtą planetų judėjimo modelį, kurio matematiniu invariantu buvo elipsinės orbitos. Tačiau, nors tai ir buvo svarbus atradimas, bet jis nepaaiškino esminių dinaminių ryšių, lemiančių šias planetų orbitas. Kita vertus, Niutonas atrado impulso ir energijos sąryšio invariantą, apibūdinantį pagrindinius procesus, įtakančius tas orbitas. Abu mokslininkai atrado po matematinę invariantą tų pačių duomenų imtims, tačiau Niutono dinaminis modelis gali būti apibendrintas ir sistemų režimams, kuriems dar nebuvo surinkti duomenys. Galime pastebėti, jog naudojantis tais pačiais duomenimis galime gauti skirtingus, tačiau teisingus, modelius. O atskiru pavyzdžiu galime priimti ir pačią galimybę gauti daugybę skaitiškai invariantinių tapatybių, kurios neturi net ir jokio ryšio su tiriamos sistemos dinamika [6]. Taigi pats baigtinių algebrinių modelių išraiškų nustatymas

nėra trivialia užduotimi. Tradiciškai, sistemas valdantieji dėsniai ir lygtys buvo nustatomi remiantis pamatiniais principais ir ekspertinėmis žiniomis. Tačiau šiuo metu didėjant turimų matavimo duomenų kiekiui ir tuo pat didėjančiam akcentui į duomenimis orientuotą modeliavimą, prasminga ieškoti algoritmų ar metodų, automatizuojančių modelių atradimą. Paprastai fizikinės sistemos buvo analizuojamos atliekant idealizuotas aproksimacijas, kuriomis remiantis vėliau būdavo išvedami diferencialinių lygčių modeliai. Tačiau sudėtingose ar realybę imituojančiose sistemose šis klasikinis požiūris tampa vis rečiau realizuotinu. Pavyzdžiui, neurologijos, epidemiologijos ar ekologijos sričių sistemoms nėra dar nustatytų pamatinių principų, todėl sudėtinga jas analizuoti. O turbulencijos [7] ir baltymų lankstymo (angl. *protein folding*) [8] sistemose pamatiniai principai reikalauja labai didelio matmenų kiekio erdvių analizavimo, todėl sunku rasti dominuojančios reakcijos dėsningumus. Tokiais atvejais dažnai pasirenkama sistemas tirti naudojantis duomenimis grįstais (angl. *data-driven*) metodais.

1.3. Problemos sprendimo būdas

Automatinio netiesinės dinaminės sistemos struktūros iš laiko eilučių duomenų nustatymo metodų paieškos buvo vykdomos jau seniai [9, 10]. Vėlesni dinaminių sistemų nustatymo uždavinio sprendimo būdai buvo kuriami naudojant tiesinius dinامينius modelius (angl. *linear dynamic models*) [11], empirinius dinامينius modelius (angl. *empirical dynamic models*) [12] ir automatinį dinamikos nustatymo metodą (angl. *automated inference of dynamics*) [13, 14]. Simbolinė regresija buvo sėkmingai pritaikyta sprendžiant dinamikos nustatymo iš duomenų uždavinius [6, 15, 16]. Gausiniai procesai (angl. *Gaussian processes*) buvo panaudoti parametrinėmis tiesinėmis lygtimis aprašytiems tvermės dėsniams nustatyti [17]. Giliojo mokymosi (angl. *deep learning*) metodai buvo panaudoti įvairioms susijusioms užduotims, pavyzdžiui, prognozuojant fizikinę dinamiką [18], nustatant netiesinių dalinių išvestinių diferencialinių lygčių parametrus [19] ar aproksimuojant netiesines dalinių išvestinių diferencialines lygtis ir jų sprendinį tuo pat metu [20]. Toliau, šiame darbe, dinaminės sistemos nustatymo uždavinys bus tiriamas išretintosios regresijos (angl. *sparse regression*) atžvilgiu [21, 22, 23]. Ši metodika remiasi mašininio mokymosi algoritmais ir naujaisiais išretinimo metodų pasiekimais [24, 25, 26], kurių dėka gaunami modeliai pasižymi saikingumu (angl. *parsimoniousness*), t. y. tinkamu modelio sudėtingumo ir tikslumo santykiu, išvengiančiu persimokymo. Metodika gali būti išplėsta tiek dalinių išvestinių diferencialinių lygčių nustatymui [27, 28], tiek modelių su racionaliosiomis netiesinėmis funkcijomis radimui [29]. Pats išretinimo metodų taikymas dinaminių sistemų tyrimui pradėtas, palyginti, neseniai [23]. Pagrindinis skirtumas nuo anksčiau minėtų modelių yra tas, kad taikant šią metodiką sistemos lygčių atrankai galima panaudoti platesnę kandidatinių funkcijų klasę, nei tai įmanoma procesais grindžiamiems modeliams [30]. Pasirinktoji metodika taip pat pasižymi struktūros paprastumu, kuris sudaro patogias galimybes įvesti papildomų sąlygų ribojimus.

1.4. Pasirinktos metodikos ypatybės

Apibendrinant automatinio dinaminės sistemos struktūros nustatymo metodus galima pastebėti, jog lygčių atradimas iš laiko eilučių, empirinis dinaminis modeliavimas, automatinis dinamikos nustatymas ar netiesinės autoregresijos slenkančio vidurkio su išoriniais kintamaisiais modeliavimas (angl. *nonlinear autoregressive model with exogenous inputs*) [31] gali būti

klasifikuojami kaip sistemos identifikavimo metodai [32]. „Identifikavimas – tai fizikinės sistemos matematinio modelio kūrimo procesas naudojant eksperimentinius duomenis“ [33]. Tuomet sistemos identifikacija gali būti laikoma tam tikra mašininio mokymosi forma, kur tiriamos sistemos įvesties–išvesties vaizdavimas, gaunamas naudojantis mokymo duomenimis, tampa apibendrinančia reprezentacija duomenims, kurie nebuvo įtraukti į mokymo duomenų imtį [56 p. 59]. Sistemos identifikavimo metodai dažniausiai remiasi regresijos modeliais, todėl pagrindiniu skirtumu tarp metodų yra pačios regresijos apribojimo sąlygos [29]. Tokios regresijos atžvilgiu modelis nėra nurodomas iš anksto, nes sistemos identifikacijos uždavinys ir siekia nustatyti nežinomąsias lygtis. Todėl modelis nustatomas naudojantis optimizavimo metodais, kurie atlieka geriausio modelio išrinkimą [32], o pati atranka derinama optimizavimo baudos nario, dar vadinamo reguliarizacijos (angl. *regularization*) nariu, pagalba. Tuomet reguliarizacijos stiprumas ir lemia pageidaujamą sprendinio išretinimą – pasiekama išretintoji regresija.

Remiantis šia metodika buvo sėkmingai identifikuoti modeliai tokiose srityse kaip: netiesinė optika [34], cheminių reakcijų dinamika [35], plazmos konvekcija [36], turbulencijos modeliavimas [37], skysčių dinamika [38] ar skaitiniai algoritmai [39]. Bazinis išretintosios identifikacijos algoritmas [23] gali būti praplėstas ir papildytas sudėtingesnėmis modeliavimo sąlygomis. Tokiu būdu išretintosios regresijos metodika gali būti taikoma ir dalinių išvestinių diferencialinių lygčių uždaviniuose [21], neišreikštinės dinamikos sistemose [29], sistemose su integraliniais nariais [40], nuspėjamojo valdymo modeliavimui (angl. *model predictive control*) [41], panaudojant tenzorines reprezentacijas [42] ar įtraukiant informacijos teorijos metodus [43].

2. Tyrimo metodika

2.1. Modelio formuluotė

Naudodami duomenis, gautus atliekant eksperimentą arba sistemos modeliavimą, ir išretintosios identifikacijos algoritmą gauname matematinį modelį, aproksimuojantį netiesinę dinaminę sistemą

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \approx \dot{\mathbf{X}} = \Theta(\mathbf{X})\Xi. \quad (1)$$

Lygties (1) kintamieji toliau bus aptariami atskirai. Tiriamos dinaminės sistemos

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \quad (2)$$

vektorių $\mathbf{x}(t) = [x_1(t) \ x_2(t) \ \cdots \ x_n(t)]^T \in R^n$ apibrėžia sistemos būseną laiko momentu t , o netiesinė funkcija $\mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$ apibrėžia sistemos dinamikos ribojimus, kurie sąlygoja sistemos sprendinio evoliucijos trajektoriją. Svarbu pastebėti, jog tiriamoji funkcija \mathbf{f} dažniausiai sudaroma iš mažo narių kiekio, todėl ją galime laikyti išretinta visų galimų funkcijų erdvėje. Pavyzdžiui, Lorenco dinaminė sistema

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \sigma(x_2 - x_1) \\ \dot{x}_2 = x_1(\rho - x_3) - x_2, \\ \dot{x}_3 = x_1x_2 - \beta x_3 \end{cases} \quad (3)$$

su parametrais $\sigma, \rho, \beta \in \mathbf{R}$, sudaryta tik iš kelių polinominių funkcijų erdvės. Būtent šis pastebėjimas ir leidžia mums naudotis išretintosios regresijos metodika, kurios pagalba galime nustatyti kurie dešinėsios lygties pusės nariai išlieka ne nulinės vertės. Funkcijos \mathbf{f} nustatymui iš duomenų sudarome sistemos būsenos kitimo laike kintamąjį $\mathbf{x}(t)$, o skaitiškai diferencijuodami duomenis \mathbf{X} gauname išvestinės $\dot{\mathbf{X}}$ eilutes $\dot{\mathbf{x}}(t)$. Tuomet diskretniais laiko momentais t_1, t_2, \dots, t_q duomenimis suformuojame dvi matricas:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^T(t_1) \\ \mathbf{x}^T(t_2) \\ \vdots \\ \mathbf{x}^T(t_q) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(t_1) & x_2(t_1) & \cdots & x_n(t_1) \\ x_1(t_2) & x_2(t_2) & \cdots & x_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1(t_q) & x_2(t_q) & \cdots & x_n(t_q) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$\dot{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}}^T(t_1) \\ \dot{\mathbf{x}}^T(t_2) \\ \vdots \\ \dot{\mathbf{x}}^T(t_q) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{x}_1(t_1) & \dot{x}_2(t_1) & \cdots & \dot{x}_n(t_1) \\ \dot{x}_1(t_2) & \dot{x}_2(t_2) & \cdots & \dot{x}_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dot{x}_1(t_q) & \dot{x}_2(t_q) & \cdots & \dot{x}_n(t_q) \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Toliau, formuojame kandidatinių funkcijų rinkinį $\Theta(\mathbf{X})$, kurį sudaro duomenų \mathbf{X} stulpeliai transformuoti netiesinėmis funkcijomis. Pavyzdžiui, matrica $\Theta(\mathbf{X})$ gali būti sudaryta iš eksponentinio ir polinominių narių bei konstantos:

$$\Theta(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} | & | & | & | & \dots & | \\ 1 & \mathbf{X} & \mathbf{X}^{P_2} & \mathbf{X}^{P_3} & \dots & \exp(\mathbf{X}) \\ | & | & | & | & \dots & | \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Šioje išraiškoje aukštesnės eilės polinomai pažymėti $\mathbf{X}, \mathbf{X}^{P_2}$ t. t. Pavyzdžiui, \mathbf{X}^{P_2} apibrėžia kvadratinius \mathbf{X} narius:

$$\mathbf{X}^{P_2} = \begin{bmatrix} x_1^2(t_1) & x_1(t_1)x_2(t_1) & \dots & x_2^2(t_1) & x_2(t_1)x_3(t_1) & \dots & x_n^2(t_1) \\ x_1^2(t_2) & x_1(t_2)x_2(t_2) & \dots & x_2^2(t_2) & x_2(t_2)x_3(t_2) & \dots & x_n^2(t_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^2(t_q) & x_1(t_q)x_2(t_q) & \dots & x_2^2(t_q) & x_2(t_q)x_3(t_q) & \dots & x_n^2(t_q) \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Kiekvienas kandidatinių funkcijų rinkinio $\Theta(\mathbf{X})$ stulpelis atitinka galimą Lorencio sistemos (3) narį. Tyrėjas savo nuožiūra pasirenka kandidatinio rinkinio netiesinių funkcijų narius, t. y. atskirai nustato kiekvieno stulpelio duomenų transformacijas. Tuomet, remiantis pastebėjimu, jog tiriamoji funkcija yra išretinta visų galimų funkcijų erdvėje, galime jau spręsti išretintosios regresijos uždavinį

$$\dot{\mathbf{X}} = \Theta(\mathbf{X})\Xi. \quad (8)$$

Šio uždavinio sprendiniu bus išretintų koeficientų vektorius $\Xi = [\xi_1 \ \xi_2 \ \dots \ \xi_n]$, nurodantis likusias po optimizacijos aktyvias netiesines funkcijas. Kiekvienas Ξ stulpelis ξ_j turi ne nulinius, vienos iš dešinėje lygybės pusėje esančių lygčių $\dot{\mathbf{x}}_j = f_j(\mathbf{x})$, koeficientus. Nustačius išretintų koeficientų matricą Ξ , kiekvieną gautojo modelio lygtį randame taip:

$$\dot{\mathbf{x}}_j = f_j(\mathbf{x}) = \Theta(\mathbf{x}^T)\xi_j. \quad (9)$$

Tuomet bendroji modelio išraiška:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}) = \Xi^T \left(\Theta(\mathbf{x}^T) \right)^T. \quad (10)$$

Pavyzdžiui, siekiant identifikuoti Lorencio sistemą (3), kintamuosius $\mathbf{X} = (x_1, x_2, x_3)$ ir jų išvestines $\dot{\mathbf{X}} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3)$ suformuojame iš sistemos duomenų. Pasirenkame kandidatinių funkcijų rinkinio $\Theta(\mathbf{X})$ variantą, sudarytą iš polinominių, iki penktos eilės, narių bei konstantos

$$\Theta(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} | & | & | & | & | & | & | & | & | & | & | \\ 1 & \mathbf{x}_1(t) & \mathbf{x}_2(t) & \mathbf{x}_3(t) & \mathbf{x}_1(t)^2 & \mathbf{x}_1(t)\mathbf{x}_2(t) & \mathbf{x}_1(t)\mathbf{x}_3(t) & \mathbf{x}_2(t)^2 & \mathbf{x}_2(t)\mathbf{x}_3(t) & \dots & \mathbf{x}_3(t)^5 \\ | & | & | & | & | & | & | & | & | & \dots & | \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Tuomet galime spręsti išretintosios regresijos uždavinį $\dot{\mathbf{X}} = \Theta(\mathbf{X})\Xi$ ir gauti išretintosios identifikacijos modelį. Žemiau pateikiama šio pavyzdžio sistemos, su parametrais $\beta = \frac{8}{3}, \rho = 28, \sigma = 10$, išretintų koeficientų matricos Ξ ir jos pagalba identifikuojamos dinamikos diferencialinių lygčių sistemos diagrama.

$$\begin{array}{c} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{array} \begin{array}{c} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{array} \begin{array}{c} \xi_3 \end{array} \left[\begin{array}{c} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_1 x_3 \\ x_2^2 \\ x_2 x_3 \\ \vdots \\ x_2^4 x_3 \\ x_3^5 \end{array} \right] \Rightarrow \begin{cases} \dot{\mathbf{x}}_1 = -9.999\mathbf{x}_1 + 9.999\mathbf{x}_2 \\ \dot{\mathbf{x}}_2 = 27.992\mathbf{x}_1 - 0.999\mathbf{x}_2 - 1.0\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3 \\ \dot{\mathbf{x}}_3 = -2.666\mathbf{x}_3 + 1.0\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 \end{cases}$$

2 pav. Identifikuoto modelio išretintų koeficientų matricos reprezentacija

Išretintosios regresijos uždavinys sprendžiamas sudarant atitinkamą iškiliojo (angl. *convex*) optimizavimo uždavinį su l_1 reguliarizacija:

$$\xi_j = \underset{\xi'_j}{\operatorname{argmin}} \left\| \dot{\mathbf{X}}_j - \Theta(\mathbf{X})\xi' \right\|_2 + \lambda \left\| \xi'_j \right\|_1. \quad (12)$$

Lygtyje (12) $\left\| \xi'_j \right\|_1$ yra reguliarizacijos nariu, o $\lambda \geq 0$ – reguliarizacijos parametru. Reguliarizacijos nario pagalba užtikrinama, jog optimizacijos sprendinys tampa stabiliu, t. y. nustatyti modelio koeficientai mažai te pasikeičia pateikus kitą tiriamos sistemos įvesties duomenų imtį. Paprastai tokio uždavinio sprendiniui rasti naudojamas mažiausio absoliutaus sutraukimo ir atrankos operatoriaus (angl. *least absolute shrinkage and selection operator*, toliau – LASSO) metodas [44]. Tačiau net ir naudojant duomenis be triukšmų, LASSO gaunami modeliai dažnai turi daug mažos vertės, bet vis vien ne lygių nuliui, koeficientų [44]. Todėl šiam optimizacijos sprendiniui rasti taikomas nuoseklus slenkstinis mažiausių kvadratų (angl. *sequential thresholded least-squares*, toliau – STLSQ) metodas [32]. Šis metodas tinkamai nustato modelio nulio vertės koeficientus, tačiau neturi konkrečios nuostolių funkcijos, todėl reikalauja atitinkamų pakeitimų, kai modifikuojamas bazinis išretintosios identifikacijos algoritmas [44].

STLSQ metodo veiksmai pradedami nuo matricos Ξ mažiausių kvadratų (angl. *least-squares*) sprendinio, kurio koeficientai, mažesnės vertės nei nurodytoji slenkstinė, prilyginami nuliui. Po to gaunamas likusių ne nulio vertės koeficientų matricos Ξ mažiausių kvadratų sprendinys. Naujojo

sprendinio koeficientai, mažesnės vertės nei nurodytoji slenkstinė, vėl prilyginami nuliui ir procedūra tęsiama tol, kol ne nulio vertės koeficientų seka tampa konverguojančia. STLSQ yra paprastai realizuojamas metodas, kuris priklauso tik nuo slenkstinės vertės parametro ir sparčiai konverguoja į išretintosios regresijos sprendinį, t. y. sprendinio pasiekimui pakanka mažo iteracijų skaičiaus. Verta pastebėti, jog sudarius kandidatinių funkcijų rinkinį $\Theta(\mathbf{X})$ vien iš tiesinių sistemos kintamųjų narių ir pašalinus regularizaciją, t. y. parinkus $\lambda = 0$, bazinis išretintosios identifikacijos algoritmas, naudojantis STLSQ, atitinka dinaminių modų dekompoziciją (angl. *dynamic mode decomposition*, trumpiau – DMD) [32 p. 250]. Žemiau pateikiamas STLSQ pritaikymo baziniam išretintosios identifikacijos algoritmui pseudokodas [45].

Input: $m \geq n$; $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ with $\text{rank}(A) = n$; $b \in \mathbb{R}^m$.

- 1: Set $k = 0$; Initialize $x^0 = A^\dagger b$ and $S^{-1} = \emptyset$;
- 2: Set $S^k = \{j \in [n] : |x_j^k| \geq \lambda\}$; Choose $\lambda > 0$ such that $S^0 \neq \emptyset$;
- 3: **while** $S^k \neq S^{k-1}$ **do**
- 4: $x^{k+1} = \text{argmin} \|Ax - b\|_2$ such that $\text{supp}(x) \subseteq S^k$;
- 5: $S^{k+1} = \{j \in [n] : |x_j^{k+1}| \geq \lambda\}$;
- 6: $k = k + 1$;
- 7: **end while**
- 8: **Output:** x^k .

3 pav. Bazinio išretintosios identifikacijos algoritmo pseudokodas

2.2. Modelio taikymo reikalavimai ir hiperparametrų modifikavimo gairės

Tyrime naudojamas bazinis išretintosios identifikacijos algoritmas priklauso nuo: 1) matavimo kintamųjų pasirinkimo; 2) duomenų kokybės; 3) išretinimo funkcijų bazės. Šios sąlygos nurodo esminius aspektus, kurie lemia modeliavimo rezultatus, todėl atskiras jų nagrinėjimas gali padėti atliekant tolimesnius modelio derinimo pasirinkimus.

Matavimo kintamųjų sąlyga nurodo, jog gaunamo modelio geba apibendrinti tiriamą dinamiką mažėja priklausomai nuo sistemos paslėptųjų kintamųjų. Paprastai nei analitiniais, nei duomenimis grįstais metodais nepavyksta suformuluoti baigtinio algebrinio modelio, kai prieinami tik daliniai dinaminės sistemos matavimai [46]. Pavyzdžiui, Schrödinger'io lygties išvesti nepavyktų remiantis vien banginės funkcijos intensyvumo matavimais [27 p. 657]. Kitaip tariant, matavimų duomenys turi apimti visą sistemos būsenos erdvę, kad būtų galima pilnai aproksimuoti dinamiką. Tačiau daugumoje realių sistemų dalis valdančiųjų dėsnų kintamųjų gali būti tiesiogiai neišmatuojamais ar likti įsimaišiusiais į kitų kintamųjų matavimus. Tokiu atveju galima naudotis Takens'o teorema [47], nurodančia, kaip laiko vėlinimų informacija papildomi daliniai matavimai gali rekonstruoti atraktorių, kuris difeomorfiškas (angl. *diffeomorphic*) visam tiriamos sistemos būsenos atraktoriui.

Išretinimo funkcijų bazės sąlyga nurodo, jog išretintosios regresijos uždavinys apibrėžiamas iš anksto nustatyta funkcijų bazės erdvei, kurioje sprendinys bus sudaromas iš išretintos tiesinės

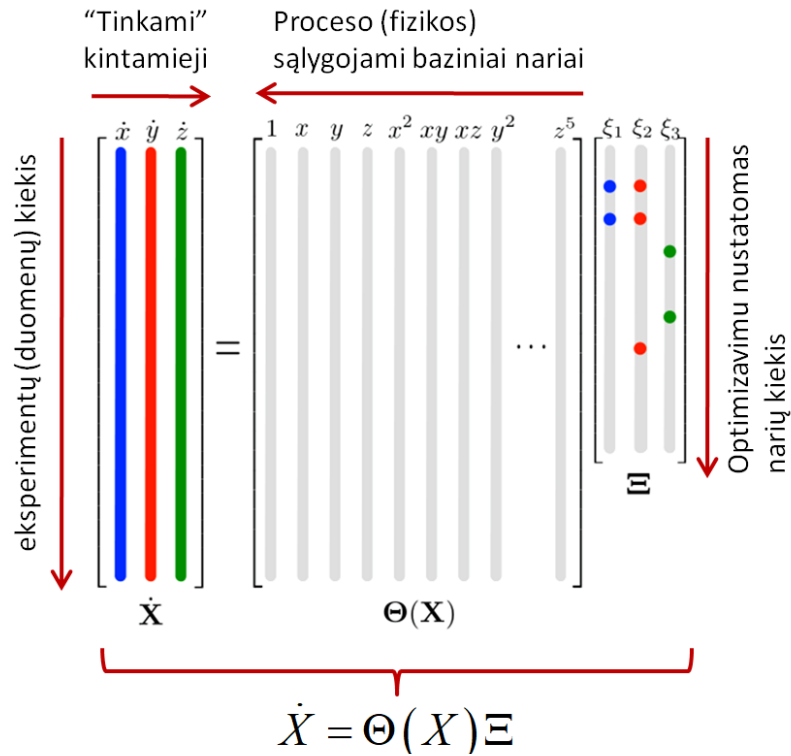
kandidatinių narių kombinacijos. Jei matavimų koordinatės negalės turėti išretintos reprezentacijos pasirinktoje funkcijų bazėje, tai algoritmui ir nepavyks identifikuoti tikslaus modelio. Paprasto sprendimo šiai problemai spręsti nėra, todėl sudarinėjant kandidatinių narių rinkinį reikia papildomai naudotis skirtingais tyrimų metodais ir remtis įvairiomis tiriamos sistemos savybių žiniomis. Todėl funkcijų bazės sudarymas pradedamas nuo išankstinių žinių apie sistemą analizavimo. Rekomenduojama modelio derinimą pradėti nuo mažo bazinių narių rinkinio ir palaipsniui jį plėsti, kol bus pasiektas norimas modelio tinkamumas (angl. *fitness*). O didėjant baziniam rinkiniui regularizacijos stiprumas paprastai taip pat didinamas. Kita vertus, didėjant kandidatinių narių rinkiniui, didėja ir statistinės koreliacijos tarp stulpelių tikimybė, kuri apsunkina tinkamo modelio identifikacijos sąlygas. Todėl reikėtų stengtis bazinį rinkinį sudarinėti iš kuo mažesnio narių skaičiaus. Verta pastebėti, jog nepavykęs tikslaus modelio identifikavimas gali suteikti vertingos diagnostinės informacijos apie sistemos matavimo kintamuosius ir funkcijų bazę.

Apibendrinant pirmąsias dvi sąlygas galima teigti, jog pagrindinė modelio formavimo prielaida yra dominuojančio poveikio narių retumas visų galimų narių funkcinėje erdvėje. Ši prielaida atitinka daugumos fizikinių sistemų dinamiką, kai ši išreiškiama modelio saikingumą palaikančioje bazėje [26].

Duomenų kokybės sąlyga nurodo, jog naudojantis žemo tikslumo matavimų, pavyzdžiui paveiktų triukšmu, turinčių išskirčių ar trūkstamų reikšmių, duomenimis identifikuoti tikslaus modelio nepavyks, nes išretintos regresijos uždaviniui spręsti dar reikės sudaryti matavimo kintamųjų išvestines. Paprastai tyrimo metu prieinami tik duomenys \mathbf{X} , o duomenų išvestinės $\dot{\mathbf{X}}$ gaunamos atliekant skaitinį diferencijavimą. Todėl matavimų triukšmais paveikus matavimų \mathbf{X} neišvengiamai bus paveikta ir matavimų išvestinės $\dot{\mathbf{X}}$, o triukšmingų duomenų skaitinės išvestinės įgis tik dar daugiau triukšmų. Pavyzdžiui, sprendžiant antros eilės tiesinių diferencialinių lygčių sistemą, net ir mažai triukšmų turintys duomenys po dviejų skaitinio diferencijavimo iteracijų reikšmingai padidins triukšmus kintamiesiems $\dot{\mathbf{X}}$. Tyrime naudojamas bazinis algoritmas yra pakankamai gerai toleruojantis triukšmus, t. y. *robust* (angl. *robust*). Tačiau algoritmo modifikacijos gali tapti labai jautriomis triukšmams [29]. Apibendrinant kalbant, išvestinių kintamųjų apskaičiavimo tikslumas yra labai svarbia sąlyga modelio tinkamumui. Todėl triukšmų poveikio sumažinimui reikia naudotis įvairiais glodinimo metodais. Pavyzdžiui, galima atlikti matavimų \mathbf{X} filtravimą su Savitzky'io–Golay'aus filtru [48] prieš pradedant išvestinių $\dot{\mathbf{X}}$ apskaičiavimą.

Papildomai reikia atkreipti dėmesį, jog duomenų kokybės sąlygą taip pat atitinka ir įvairumas. Siekiant išsamiau identifikuoti dinamiką į duomenis turėtų būti įtrauktos ir sistemos būsenos turinčios skirtingų sužadintų pereinamųjų procesų. Pavyzdžiui, labiau aprėpti sistemos būsenų įvairovę galima sudarant matavimo kintamųjų laiko eilutes didesniai pradinių sąlygų skaičiui. Tokiu būdu galima tiksliau identifikuoti aktyvius kandidatinių funkcijų narius.

Žemiau pateikiama pavyzdinės Lorencio sistemos identifikuoto modelio išretintosios regresijos uždavinio (8) hiperparametrų įtakos sričių diagrama.



4 pav. Modelio hiperparametrų įtakos sričių diagrama

Apibendrinant diagramą galima nurodyti, jog: 1) modelio identifikacijos korektiškumą lemia teisingas matavimo kintamųjų parinkimas, kuris atitinka tiriamos dinamikos pagrindines dimensijas; 2) identifikuojamos sistemos kandidatiniai nariai atitinka tiriamos dinamikos procesų dėsningumą funkcinis sąryšius; 3) identifikuojamos sistemos išsamumas priklauso ne tik nuo tyrimo duomenų kiekio, bet ir nuo duomenimis aprėpiamos sistemos būsenų įvairovės; 4) identifikuojamos sistemos narių kiekis priklauso nuo išretintosios regresijos uždavinio optimizavimo metodo rezultato.

2.3. Modelio programinė realizacija

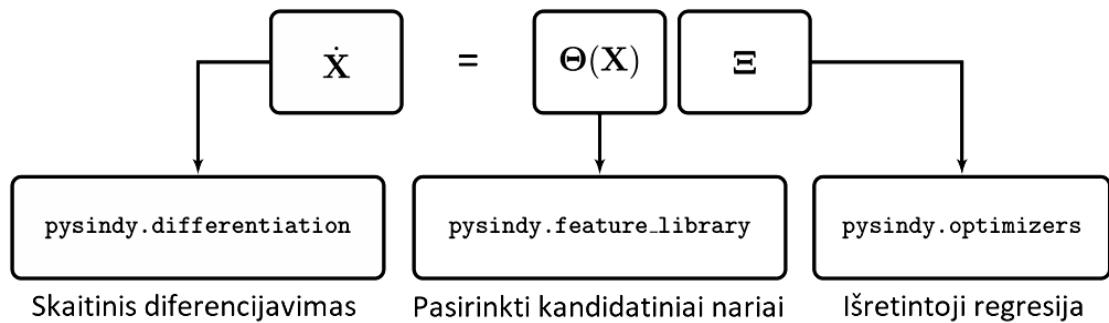
Netiesinės dinamikos išretintosios identifikacijos algoritmo programinei realizacijai tyrime naudojame *Python* programavimo kalbos biblioteką *PySINDy*¹ [49].

PySINDy modelio apskaičiavimui reikia nurodyti optimizavimo ir diferencijavimo metodus. Tuomet pateikti sistemos būsenos matavimų duomenų matricą \mathbf{X} , iš kurių bus apskaičiuojama išvestinių reikšmių matrica $\dot{\mathbf{X}}$. Ir nurodyti kandidatinių narių rinkinio $\Theta(\mathbf{X})$ bazines funkcijas $\theta_1(\mathbf{x}), \theta_2(\mathbf{x}), \dots, \theta_h(\mathbf{x})$. Po šių veiksmų *PySINDy* jau bus parengtas spręsti regresijos uždavinį, t. y. aproksimuoti išretintą tiriamos sistemos (2) dinamiką

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \approx \sum_{j=1}^h \theta_j(\mathbf{x}) \xi_j. \quad (13)$$

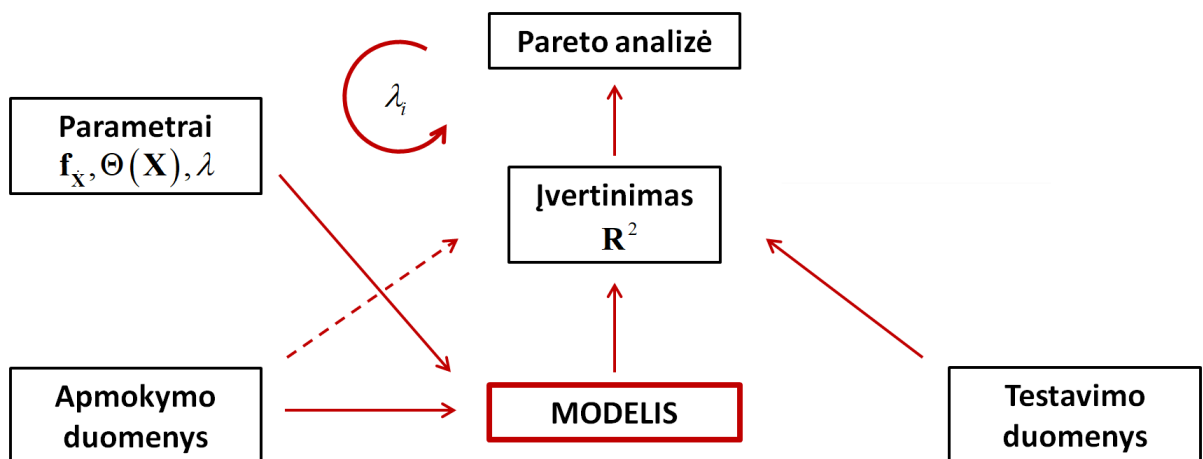
¹ <https://github.com/dynamicslab/pysindy>

Gaunamame modelyje dauguma vektoriaus ξ_j elementų lieka nuliais, o ne nuliniai elementai, atitinka aktyvius dinamikos narius. Žemiau pateikiama sąryšio tarp išretintosios regresijos uždavinio (8) ir programinės realizacijos paruošimo etapų diagrama [49].



5 pav. Programinės realizacijos paruošimo etapų diagrama

Šiame tyrime atliekama *PySINDy* modelio atranka naudojantis Pareto analize [23, 43 p. 2]. Modelio skaičiavimų parengimui nurodomas skaitinio diferencijavimo metodas $f_{\dot{X}}$, kandidatinių narių rinkinys $\Theta(X)$ ir išretintosios regresijos optimizavimo metodo parametras λ . STLSQ metodo naudojimo atveju optimizavimo parametras λ atitinka ir reguliarizacijos parametą. Panaudojant apmokymo ir testavimo duomenis gautasis modelis įvertinamas regresijos modelių kokybės matu R^2 . Galiausiai sudaromas modelio kokybės įverčio priklausomybės nuo reguliarizacijos parametro grafikas. Grafiko kreivės vieta, kurioje pastebimas „perlinkis“, atitinka optimalią modelio sudėtingumo ir modelio tikslumo santykio vertę. Tą grafiko poziciją atitinkantis modelis ir pasirenkamas tinkamiausiu (angl. *best fit*). Žemiau pateikiama tyrime naudotos *PySINDy* modelio atrankos schema.

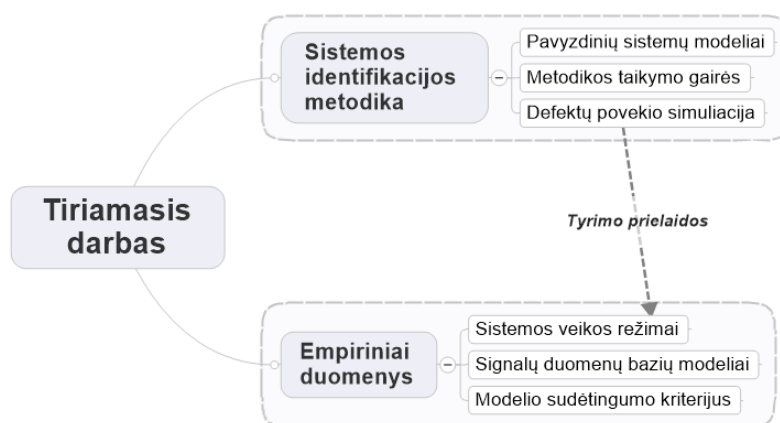


6 pav. Modelio atrankos programinės realizacijos schema

Tyrimo programos kodas pateikiamas priede nr. 1.

2.4. Tyrimo prielaidos ir metodikos palyginimas

Šiame tyrime, remiantis įžvalga, jog inžinerinėse ir biologinėse sistemose dažnai galima išskirti normalios ir išderintos veikos režimus, priimama prielaida, kad identifikuojamos dinaminės sistemos veikos režimų modelių sudėtingumas gali būti įvertintas algebriniu sudėtingumo kriterijumi. Kitaip tariant, priimama tyrimo prielaida, jog sistemos normalios veikos režimo sudėtingumo kriterijus įverčio prasme yra mažesnis nei tos pačios sistemos jau išderintos veikos režimo sudėtingumo kriterijaus įvertis. Todėl gebėdami identifikuoti dinaminės sistemos algebrinį modelį galime tikėtis, tolimesniais tyrimais, nustatyti ir sudėtingumo kriterijų, kuris klasifikuotų sistemos veikos režimus. Tyrime taip pat priimama, jog sistemos režimo perėjimas iš normalios veikos į išderintąją yra sąlygojamas defektu, o patys defektai, analitinių sistemų atžvilgiu, gali būti apibūdinami prie sistemos pridedamu triukšmu. Atskiras defekto apibrėžimas įvedamas norint aiškiau formuoti ir tiksliau įvertinti tyrimo eigos užduotis. Todėl apibrėžiamuoju supaprastinimu siekiama ne vien iširti triukšmo poveikį, bet sekančiomis tyrimo eigos užduotimis, naudojantis patikrinta metodika, jau pereiti ir prie realių duomenų tyrimo. Tokiu atveju triukšmas, pridedamas prie tiriamos sistemos sprendinio, atitinka supaprastintą analitinės sistemos išderintos veikos režimo bendrąjį požymį. Žemiau pateikiama tyrimo prielaidų sąryšio su tyrimo metodika ir empiriniais duomenimis struktūrinė diagrama.



7 pav. Tiriamojo darbo prielaidų sąryšio su uždaviniais struktūrinė diagrama

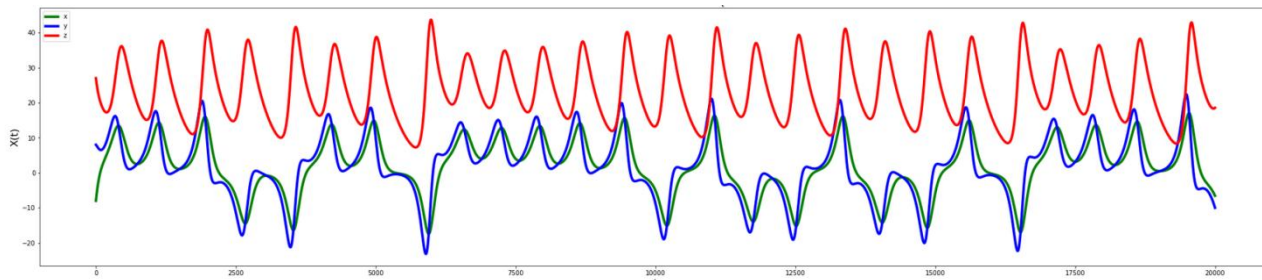
Ekvivalentaus tyrimo, sprendžiančio netiesinių dinaminių sistemų defektų nustatymo uždavinį ir naudojančio išretintosios identifikacijos algoritmo realizaciją *PySINDy*, moksliniuose straipsniuose nebuvo aptikta. Tačiau yra keletas savo tematika ir metodika artimų šaltinių. Pirmasis variantas [50] naudoja cheminio reaktoriaus duomenis procesų evoliucijos prognozavimui. Tyrimo metodika identifikuoja sistemos dinamiką naudojantis *PySINDy* realizacija ir nustato funkcinius sąryšius tarp identifikuotų modelių giliojo neuroninio tinklo (angl. *deep neural network*, trumpiau – DNN) pagalba. Tyrimu siekiama užtikrinti realaus laiko sistemos būsenos prognozavimą ir procesų rizikos profilių nustatymą. Antrasis variantas [51] naudoja idiopatinės plaučių fibrozės klinikinių tyrimų duomenis ligos progresavimui prognozuoti. Tyrimo metodika naudoja įvairius mašininio mokymosi algoritmus, tarp jų ir *PySINDy*, sistemos dinamikos identifikavimui. Tyrimu siekiama populiacijos atžvilgiu įvertinti paciento ligos eigą ir nustatyti ar pacientui paskirti medikamentai padeda, ar reikia svarstyti juos pakeisti kitais. Abiem paminėtais atvejais defektas apibrėžiamas skirtingai, tačiau atlieka tą pačią dinamikos skirstymo į normalios ir išderintos veikos režimus funkciją. Taip

pat buvo pastebėti keli straipsniai, kurie sprendžia defektų nustatymo uždavinį naudojantis išretintos regresijos metodika, tačiau nenaudoja *PySINDy* realizacijos [52, 53, 54]. Bei – straipsnis, kuriame netiesinės dinaminės sistemos defektai nustatomi kitokiu sistemos identifikavimo metodu, papildomai naudojantis Lipschitz'o kriterijumi [55].

3. Tyrimų rezultatai

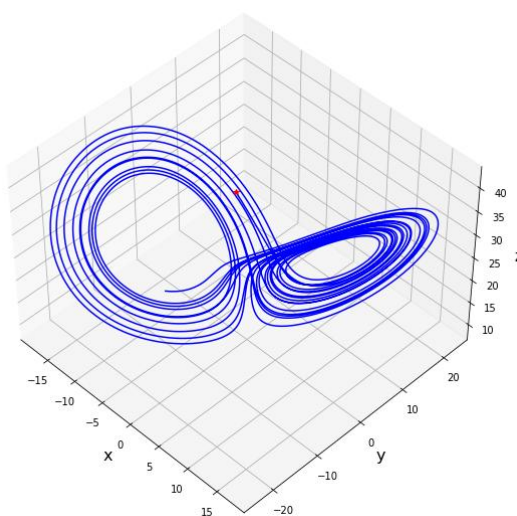
3.1. Analitinės sistemos normalios veikos režimo duomenys

PySINDy modelio patikrinimui sugeneruojame pavyzdinės Lorencio sistemos (3), su parametrais $\beta = \frac{8}{3}, \rho = 28, \sigma = 10$ ir pradinėmis sąlygomis $\mathbf{x}_0 = (-8, 8, 27)$, sprendinio laiko eilutės. Tai bus tyrimo analitinių duomenų imtis.



8 pav. Tiriamos Lorencio sistemos duomenų laiko eilutės

Žemiau pateikiama Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija. Mėlyna ištisinė linija vaizduoja sistemos sprendinio kreivę, gautą iš laiko eilučių duomenų. Raudonu tašku pažymėtos sistemos pradinės sąlygų koordinatės $\mathbf{x}_0 = (-8, 8, 27)$.



9 pav. Tiriamos Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija

PySINDy modeliui nurodoma naudoti skaitinį diferencijavimą, kandidatinių funkcijų rinkinį, sudarytą iš polinominių, iki trečios eilės, narių bei konstantos, o išretinimui atlikti STLSQ metodą. Duomenų imčiai naudojamos Lorencio sistemos laiko eilutės. Tuomet nustatant reguliarizacijos parametą λ identifikuojamas duomenis apibūdinantis modelis. Žemiau pateikiami *PySINDy* skaičiavimo rezultatų pranešimai parametro reikšmėms $\lambda=0, \lambda=0.1, \lambda=1$.

$$\begin{aligned}
 (x)' &= -0.001 \cdot 1 + -10.005 x + 10.003 y \\
 (y)' &= -0.015 \cdot 1 + 27.991 x + -0.998 y + 0.002 z + -1.000 x z \\
 (z)' &= 0.008 \cdot 1 + 0.006 x + -0.004 y + -2.666 z + 0.001 x^2 + 0.999 x y
 \end{aligned}$$

10 pav. *PySINDy* identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=0$

$$\begin{aligned}
 (x)' &= -9.999 x + 9.999 y \\
 (y)' &= 27.992 x + -0.999 y + -1.000 x z \\
 (z)' &= -2.666 z + 1.000 x y
 \end{aligned}$$

11 pav. *PySINDy* identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=0.1$

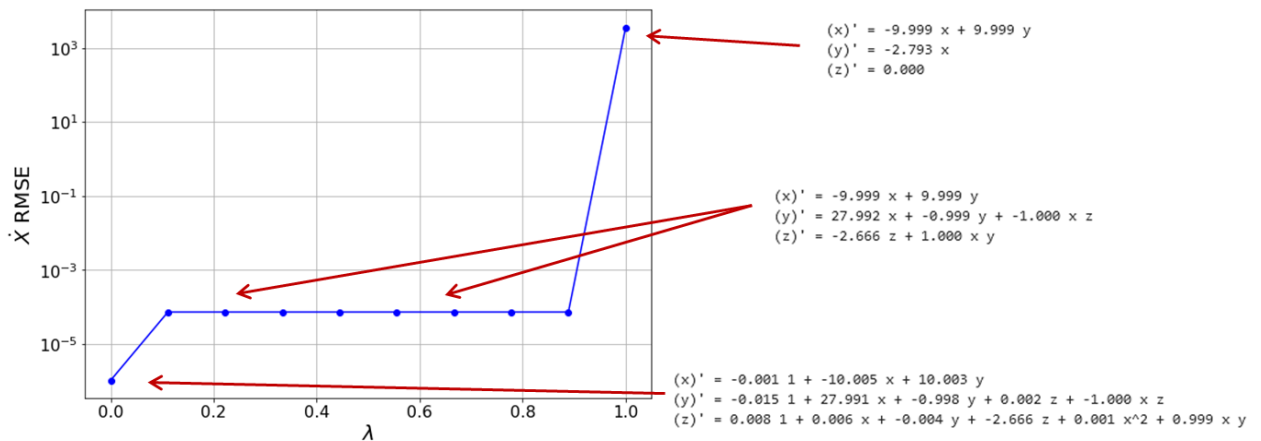
PySINDy pateikiamo identifikavimo rezultato, kai $\lambda=0.1$, palyginimas su pirmine Lorencio lygčių sistema:

$$\begin{cases} x = -9.999x + 9.999y \\ y = 27.992x - 0.999y - 1.0xz \\ z = -2.666z + 1.0xy \end{cases} \equiv \begin{cases} x = 9.999(y-x) \\ y = x(27.992 - 1.0z) - 0.999y \\ z = 1.0xy - 2.666z \end{cases} \approx \begin{cases} \dot{x} = 10(y-x) \\ \dot{y} = x(28-z) - y \\ \dot{z} = xy - \frac{8}{3}z \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
 (x)' &= -9.999 x + 9.999 y \\
 (y)' &= -2.793 x \\
 (z)' &= 0.000
 \end{aligned}$$

12 pav. *PySINDy* identifikuoto Lorencio sistemos modelio lygčių sistema, kai $\lambda=1$

Modelio tikslumui vertinti naudojamosi schemas 6 pav. programine realizacija.

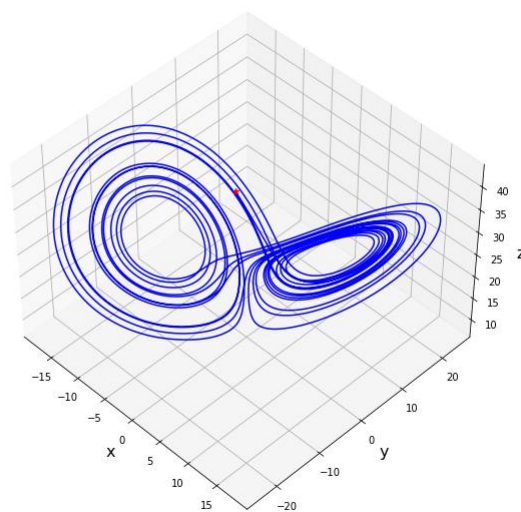


13 pav. Identifikuotos Lorencio sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafikas su *PySINDy* lygčių sistemų nuorodomis

Identifikuotos sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafike (13 pav.) randame modelius kai $\lambda = 0$, kai $\lambda = 1$ ir vieną tą patį modelį prie visų likusių λ reikšmių. Grafiko pradžioje matome modelio permokymo situaciją. Kai $\lambda = 0$ regularizacija neatmeta jokių

kandidatinių narių, todėl turime sudėtingiausią modelį bei mažiausią paklaidą vienai apmokymo duomenų imčiai. Panaudojus reguliarizaciją gauname saikingiausią modelį, kuris nebesikeičia parametrai didėjant intervale $\lambda \in [0.1; 0.9]$. O pasiekus $\lambda = 1$ modelyje pašalinama per daug kandidatinių narių, nebe pavyksta tinkamai nusakyti sistemos dinamikos ir modelio daromos paklaidos žymiai padidėja. Pareto analize tinkamiausiu parenkamas modelis prie $\lambda = 0.1$, kuris atitinka ir modelį prie $\lambda = 0.9$.

Žemiau pateikiama identifikuotos Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija. Mėlyna ištisinė linija vaizduoja sistemos, identifikuotos kai $\lambda = 0.1$, sprendinio kreivę. Raudonu tašku pažymėtos sistemos pradinės sąlygų koordinatės $\mathbf{x}_0 = (-8, 8, 27)$. Identifikuotos sistemos trajektorija pastebimai nesiskiria nuo analitinės sistemos trajektorijos.

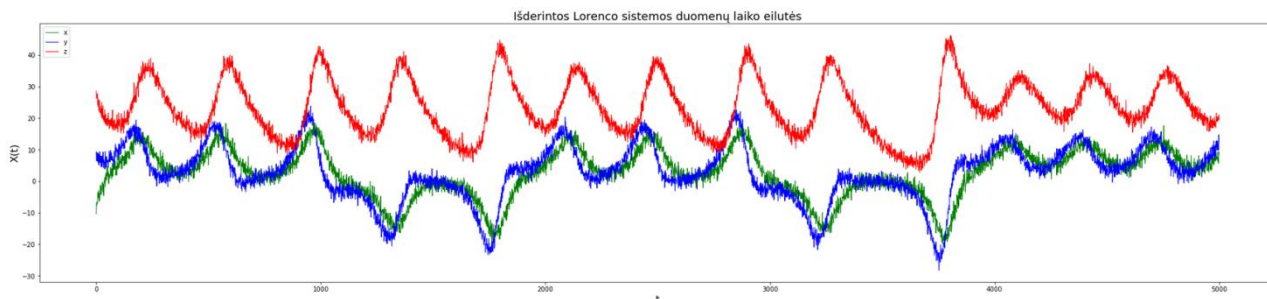


14 pav. Identifikuotos Lorencio sistemos būsenos evoliucijos trajektorija, kai $\lambda=0.1$

Gautieji skyrelio 3.1 rezultatai parodo, jog tinkamai parinkus metodikos parametrus analitinės dinaminės sistemos modelis gali būti identifikuotas naudojantis vien tiriamos sistemos stebėjimų duomenimis.

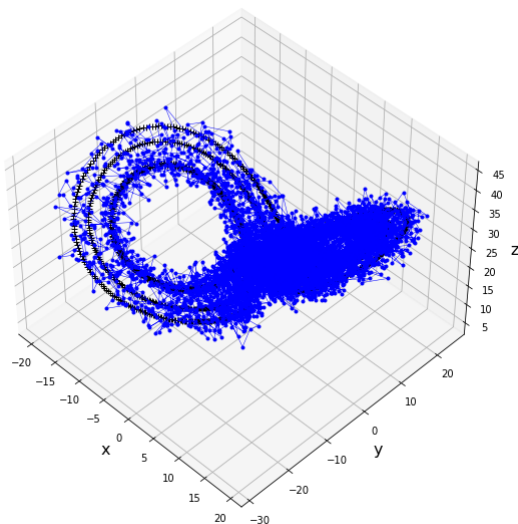
3.2. Analitinės sistemos išderintos veikos režimo duomenys

Sistemos išderintos veikos režimo duomenys gaunami prie analitinės Lorencio sistemos trajektorijos pridėdant Gausinio pasiskirstymo triukšmą $(x, y, z) + N(0, RMSE) \cdot 10\%$.

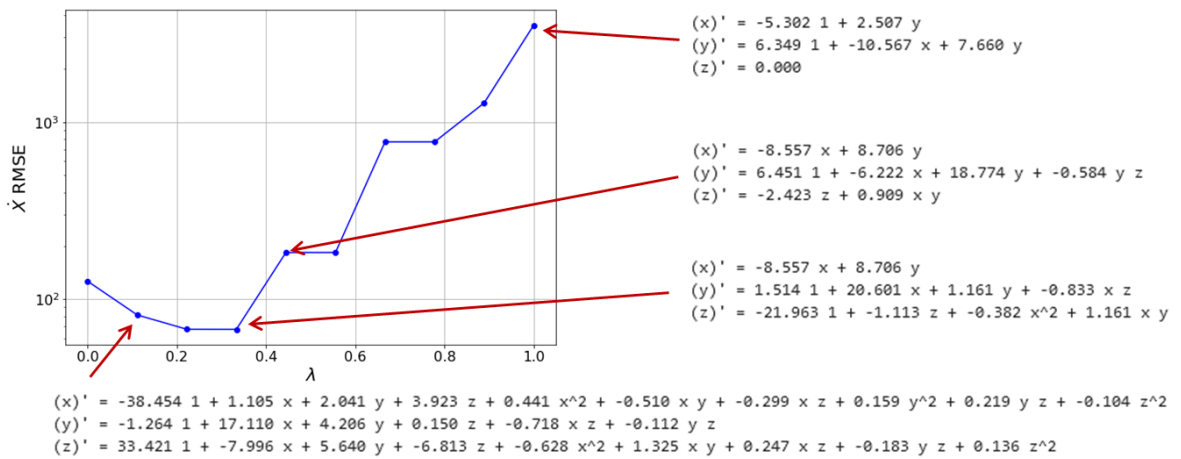


15 pav. Išderintos Lorencio sistemos duomenų laiko eilutės

Žemiau pateikiama išderintos Lorencio sistemos būsenos trajektorija, gauta prie pirminės Lorencio sistemos trajektorijos pridėdant Gausinio pasiskirstymo triukšmą. Juodos spalvos kryželio simboliais pažymėti pirminės Lorencio sistemos trajektorijos taškai. Mėlyna ištisinė linija vaizduoja išderintos sistemos trajektoriją, o mėlynais taškais atžymimi tos trajektorijos matavimų taškai.



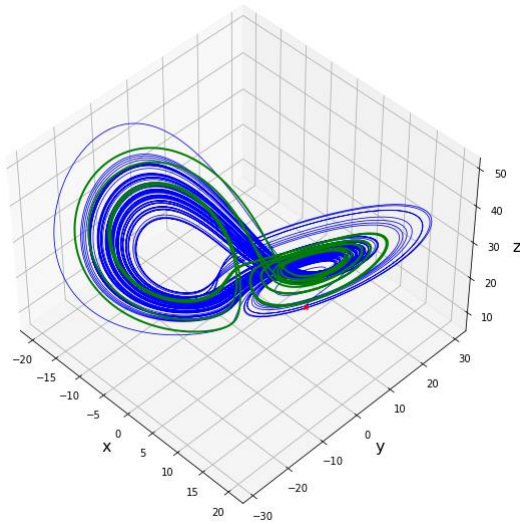
16 pav. Išderintos Lorencio sistemos būsenos trajektorija



17 pav. Identifikuotos išderintos Lorencio sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafikas su *PySINDy* lygčių sistemų nuorodomis

Identifikuotos išderintos sistemos modelio tikslumo priklausomybės nuo sudėtingumo grafiko (17 pav.) pradžioje matome aiškų modelio permokymą. Padidėjus parametru λ sumažėjo modelio paklaida, nes kartu sumažėjo ir persimokymą lemiančių lygties narių skaičius, todėl modelis tapo tikslesniu. Didėjant parametro λ vertei, toliau mažinamas modelio sudėtingumas, t. y. pašalinama vis daugiau kandidatinių narių iš modelio. Tačiau pastebime, jog tikslumas pažingsniui pradeda mažėti – modelio daromų paklaidų vertė auga, nes atmetami svarbūs modelio dinamikai nusakyti nariai. Šiuo atveju, Pareto analize tinkamiausiu parenkamas modelis prie $\lambda = 0.333$ (toliau – $\lambda_{0.333}$). Iš pirmo žvilgsnio modelis $\lambda_{0.333}$ neatrodo saikingesniu nei $\lambda_{0.444}$, tačiau pastebėjus, jog abu modeliai turi skirtingų pašalinių kandidatinių narių atitinkamose lygčių sistemos eilutėse, galime teigti, jog didesnę įtaką modelio tikslumui turi būtent modelyje $\lambda_{0.333}$ esantys atskiri nariai, kurių nėra modelyje $\lambda_{0.444}$.

Žemiau pateikiamos išderintos ir pirminės Lorencio sistemų būsenų evoliucijos trajektorijos. Mėlyna ištisinė linija vaizduoja sistemos, identifikuotos kai $\lambda = 0.444$, sprendinio kreivę. Raudonu tašku pažymėtos išderintos sistemos pradinių sąlygų koordinatės $\mathbf{x}_0 = (8, 7, 15)$. O žalia ištisinė linija vaizduoja normalios veikos režimo Lorencio sistemos sprendinį. Matome, jog trajektorijos skiriasi, tačiau aiškiai išlaiko difeomorfinį ekvivalentumą.



18 pav. Identifikuotos išderintos ir pirminės Lorencio sistemų būsenų evoliucijos trajektorijos

Gautieji skyrelio 3.2 rezultatai parodo, jog naudojantis ir triukšmingais duomenimis identifikuojamas modelis yra panašus į pirminę analitinę dinaminę sistemą. Gaunamų modelių panašumą reikėtų atskirai vertinti remiantis tinkamais sistemų dinamikos tyrimo metodais, todėl detalesnis palyginimo įvertinimas tampa atskiru tyrimo uždaviniu. Kita vertus, gavome skirtingus identifikuotus išderintos ir pirminės sistemų modelius, todėl galime pereiti prie sistemos veikos režimus klasifikuojančio sudėtingumo kriterijaus paieškų.

Apibendrinimas

Rezultatai

1. Įsisavintas ir patikrintas netiesinių dinaminių sistemų modelių formavimo proceso automatizavimas pasirinkto mašininio mokymosi metodu.
2. Išnagrinėtas baigtinių algebrinių modelių išraiškų nustatymo sudėtingose, realybę imituojančiose sistemose ir labai didelio matmenų kiekio erdvių analizavimo problemos sprendimo variantas.
3. Nurodytas pasirinktos metodikos naujumas, skiriamasis požymis bei esminis skirtumas lyginant su kitais automatinio dinaminių sistemų struktūros nustatymo metodais.
4. Nurodyti pasirinktos metodikos taikymo variantai ir pasiekimai, minimi kitų autorių straipsniuose.
5. Sėkmingai patikrinta dinaminės sistemos automatinės identifikacijos metodika pavyzdinei sistemai.
6. Pateikti panašūs sistemos veikos režimų klasifikavimo tyrimų darbai moksliniuose šaltiniuose.
7. Suformuluoti pagrindiniai metodikos bazinio algoritmo taikymo reikalavimai ir nurodytos modelio hiperparametrų įtakos sritys: 1) matavimo kintamieji; 2) išretinimo funkcijų bazė; 3) duomenų kokybė; 4) optimizavimo parametrai.
8. Pateikiami tyrimo eigoje iškilusių uždavinių sprendimo variantai: 1) laiko vėlinimų metodas; 2) kandidatinių narių rinkinio mažinimo motyvas; 3) duomenų triukšmų filtravimo svarba; 4) papildomų pereinamųjų procesų išnaudojimas.

Išvados

1. Automatinis dinaminių sistemų struktūros identifikavimas, remiantis išretintosios regresijos metodika, atitinka mašininio mokymosi metodų taikymo principinius dėsningumus. Modelio tikslumo ir sudėtingumo priklausomybės vertinime aptinkamos permokymo, neprimokymo ir saikingumo situacijos.
2. Tinkamas modelio taikymas reikalauja detalaus išretintosios identifikacijos algoritmo esminių aspektų išmanymo.
3. Nepavykusio modelio identifikavimo rezultatus galima naudoti kaip diagnostinę informaciją sistemos matavimo kintamųjų ir funkcijų bazės pasirinkimų atžvilgiu.

Pastebėjimai

1. Nurodytas ne trivialus pastebėjimas, jog bazinis išretintosios identifikacijos algoritmas, naudojantis nuoseklų slenkstinį mažiausių kvadratų metodą ir tam tikrą kandidatinių funkcijų rinkinį, atitinka dinaminių modų dekompoziciją.

Rekomendacijos

Tolimesniam tyrimui, naudojant realios sistemos duomenis, siūloma nuosekliai įvertinti algoritmo taikymo aspektus, remiantis suformuluotomis hiperparametrų modifikavimo gairėmis. O sekančiais darbais rekomenduojama pasirinkti: 1) realizuoti bazinio algoritmo modifikavimą racionaliųjų netiesinių funkcijų uždaviniams spręsti [29]; 2) bazinio algoritmo Pareto analizę pakeisti Akaike informacinio kriterijaus (angl. *Akaike information criterion*, trumpiau – AIC) vertinimu [43]; 3) išretintosios identifikacijos bazinio algoritmo rezultatus palyginti su simbolinės regresijos metodo rezultatais [57].

Literatūros sąrašas

1. PTOLEMY, C. *The almagest: introduction to the mathematics of the heavens*. Green Lion Press, 2014. ISBN 1-888009-43-8.
2. KOYRÉ, A. *The Astronomical Revolution: Copernicus-Kepler-Borelli*. Routledge, 2013. ISBN 0-203-70631-5.
3. NEWTON, I. *The Principia: mathematical principles of natural philosophy*. Univ of California Press, 1999. ISBN 0-520-93510-1.
4. POINCARÉ, H. The three-body problem and the equations of dynamics: Poincaré's foundational work on dynamical systems theory. Springer, 2017. ISBN 3-319-52899-8.
5. HANC, J. ir kt. Symmetries and conservation laws: Consequences of Noether's theorem. In *American Journal of Physics* . 2004. Vol. 72, no. 4, p. 428–435.
6. SCHMIDT, M. – LIPSON, H. Distilling free-form natural laws from experimental data. In *science* . 2009. Vol. 324, no. 5923, p. 81–85.
7. L'VOV, V. – PROCACCIA, I. Hydrodynamic turbulence: a 19th century problem with a challenge for the 21st century. In *Turbulence modeling and vortex dynamics*, Springer, 1997. p. 1–16.
8. DILL, K.A. ir kt. The protein folding problem: when will it be solved? In *Current opinion in structural biology* . 2007. Vol. 17, no. 3, p. 342–346.
9. PACKARD, N.H. ir kt. Geometry from a time series. In *Physical review letters* . 1980. Vol. 45, no. 9, p. 712.
10. CRUTCHFIELD, J.P. - MCNAMARA, B. Equations of motion from a data series. In *Complex systems*. 1987. Vol. 1, p. 417–452.
11. FRISTON, K.J. ir kt. Dynamic causal modelling. In *Neuroimage* . 2003. Vol. 19, no. 4, p. 1273–1302.
12. SUGIHARA, G. ir kt. Detecting causality in complex ecosystems. In *science* . 2012. Vol. 338, no. 6106, p. 496–500.
13. DANIELS, B.C. – NEMENMAN, I. Automated adaptive inference of phenomenological dynamical models. In *Nature communications*. 2015. Vol. 6, no. 1, p. 1–8.
14. DANIELS, B.C. – NEMENMAN, I. Efficient inference of parsimonious phenomenological models of cellular dynamics using S-systems and alternating regression. In *PloS one*. 2015. Vol. 10, no. 3.
15. BONGARD, J. – LIPSON, H. Automated reverse engineering of nonlinear dynamical systems. In *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2007. Vol. 104, no. 24, p. 9943–9948.
16. SCHMIDT, M.D. ir kt. Automated refinement and inference of analytical models for metabolic networks. In *Physical biology*. 2011. Vol. 8, no. 5.
17. RAISSI, M. ir kt. Machine learning of linear differential equations using Gaussian processes. In *Journal of Computational Physics*. 2017. Vol. 348, p. 683–693.
18. MROWCA, D. ir kt. Flexible neural representation for physics prediction. In *Advances in neural information processing systems*. 2018. Vol. 31.
19. RAISSI, M. ir kt. Physics informed deep learning (part I): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations. In *arXiv preprint arXiv:1711.10561*. 2017.
20. RAISSI, M. Deep hidden physics models: Deep learning of nonlinear partial differential equations. In *The Journal of Machine Learning Research*. 2018. Vol. 19, no. 1, p. 932–955.
21. SCHAEFFER, H. ir kt. Sparse dynamics for partial differential equations. In *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2013. Vol. 110, no. 17, p. 6634–6639.
22. PROCTOR, J.L. ir kt. Exploiting sparsity and equation-free architectures in complex systems. In *The European Physical Journal Special Topics*. 2014. Vol. 223, no. 13, p. 2665–2684.

23. BRUNTON, S.L. ir kt. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. In *Proceedings of the national academy of sciences*. 2016. Vol. 113, no. 15, p. 3932–3937.
24. CANDÈS, E.J. – WAKIN, M.B. An introduction to compressive sampling. In *IEEE signal processing magazine*. 2008. Vol. 25, no. 2, p. 21–30.
25. WANG, W.-X. ir kt. Predicting catastrophes in nonlinear dynamical systems by compressive sensing. In *Physical review letters*. 2011. Vol. 106, no. 15, p. 154101.
26. BRUNTON, S.L. ir kt. Compressive sensing and low-rank libraries for classification of bifurcation regimes in nonlinear dynamical systems. In *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*. 2014. Vol. 13, no. 4, p. 1716–1732.
27. RUDY, S.H. ir kt. Data-driven discovery of partial differential equations. In *Science advances*. 2017. Vol. 3, no. 4, p. e1602614.
28. SCHAEFFER, H. Learning partial differential equations via data discovery and sparse optimization. In *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2017. Vol. 473, no. 2197.
29. MANGAN, N.M. ir kt. Inferring biological networks by sparse identification of nonlinear dynamics. In *IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications*. 2016. Vol. 2, no. 1, p. 52–63.
30. SILVA, B.M. DE ir kt. Discovery of physics from data: universal laws and discrepancies. In *Frontiers in artificial intelligence*. 2020. Vol. 3, p. 25.
31. BILLINGS, S.A. Nonlinear system identification: NARMAX methods in the time, frequency, and spatio-temporal domains. John Wiley & Sons, 2013. ISBN 1-119-94359-0.
32. BRUNTON, S.L. – KUTZ, J.N. *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems, and control*. Cambridge University Press, 2022. ISBN 1-00-909848-9.
33. JUANG, J.-N. – PHAN, M.Q. *Identification and control of mechanical systems*. Cambridge University Press, 2001. ISBN 1-139-43011-4.
34. SOROKINA, M. ir kt. Sparse identification for nonlinear optical communication systems: SINO method. In *Optics express*. 2016. Vol. 24, no. 26, p. 30433–30443.
35. HOFFMANN, M. ir kt. Reactive SINDy: Discovering governing reactions from concentration data. In *The Journal of chemical physics*. 2019. Vol. 150, no. 2.
36. DAM, M. ir kt. Sparse identification of a predator-prey system from simulation data of a convection model. In *Physics of Plasmas*. 2017. Vol. 24, no. 2.
37. SCHMELZER, M. ir kt. Discovery of algebraic Reynolds-stress models using sparse symbolic regression. In *Flow, Turbulence and Combustion*. 2020. Vol. 104, no. 2, p. 579–603.
38. LOISEAU, J.-C. Data-driven modeling of the chaotic thermal convection in an annular thermosyphon. In *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*. 2020. Vol. 34, no. 4, p. 339–365.
39. THALER, S. ir kt. Sparse identification of truncation errors. In *Journal of Computational Physics*. 2019. Vol. 397.
40. SCHAEFFER, H. - MCCALLA, S.G. Sparse model selection via integral terms. In *Physical Review E*. 2017. Vol. 96, no. 2.
41. KAISER, E. ir kt. Sparse identification of nonlinear dynamics for model predictive control in the low-data limit. In *Proceedings of the Royal Society A*. 2018. Vol. 474, no. 2219.
42. GELSS, P. ir kt. Multidimensional approximation of nonlinear dynamical systems. In *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*. 2019. Vol. 14, no. 6.

43. MANGAN, N.M. ir kt. Model selection for dynamical systems via sparse regression and information criteria. In *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2017. Vol. 473, no. 2204.
44. CHAMPION, K. ir kt. A unified sparse optimization framework to learn parsimonious physics-informed models from data. In *IEEE Access*. 2020. Vol. 8, p. 169259–169271.
45. ZHANG, L. – SCHAEFFER, H. On the convergence of the SINDy algorithm. In *Multiscale Modeling & Simulation*. 2019. Vol. 17, no. 3, p. 948–972.
46. BAKARJI, J. ir kt. Discovering Governing Equations from Partial Measurements with Deep Delay Autoencoders. In *arXiv preprint arXiv:2201.05136*. 2022.
47. TAKENS, F. Detecting strange attractors in turbulence. In *Dynamical systems and turbulence, Warwick 1980*. Springer, 1981. p. 366–381.
48. SAVITZKY, A. – GOLAY, M.J. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. In *Analytical chemistry*. 1964. Vol. 36, no. 8, p. 1627–1639.
49. SILVA, B.M. DE ir kt. Pysindy: a python package for the sparse identification of nonlinear dynamics from data. In *Journal of Open Source Software*. 2020. Vol. 5, no. 49. doi: 10.21105/joss.02104
50. BHADRIRAJU, B. ir kt. Dynamic risk-based fault prediction of chemical processes using online sparse model identification. In *2021 American Control Conference (ACC)*. IEEE, 2021. p. 4964–4969.
51. SUBRAMANIAN, H. Combining scientific computing and machine learning techniques to model longitudinal outcomes in clinical trials. Master's thesis. Linköpings universitet. Linköping, 2021.
52. DERBEL, S. ir kt. Fault diagnosis via a dynamical sparse recovery method and application to a gearbox system. In *Journal of Vibration and Control*. 2021. Vol. 27, no. 11–12, p. 1420–1439.
53. WANG, C. ir kt. A supervised sparsity-based wavelet feature for bearing fault diagnosis. In *Journal of Intelligent Manufacturing*. 2019. Vol. 30, no. 1, p. 229–239.
54. ZHAO, Z. ir kt. A weighted multi-scale dictionary learning model and its applications on bearing fault diagnosis. In *Journal of Sound and Vibration*. 2019. Vol. 446, p. 429–452.
55. ZHENG, J. ir kt. Detection of winding faults based on a characterization of the nonlinear dynamics of transformers. In *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*. 2018. Vol. 68, no. 1, p. 206–214.
56. DURIEZ, T. ir kt. *Machine learning control-taming nonlinear dynamics and turbulence*. Springer, 2017. ISBN 3-319-40624-8.
57. CRANMER, M. ir kt. Discovering symbolic models from deep learning with inductive biases. In *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2020. Vol. 33, p. 17429–17442.