

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»
РОССИЙСКАЯ АССОЦИАЦИЯ НЕЙРОИНФОРМАТИКИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ СИСТЕМНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ РАН

НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2015

ХVII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ с международным участием

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

ЧАСТЬ 2

- **НЕЙРОСЕТЕВЫЕ СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ,
РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ И УПРАВЛЕНИЯ**
- **АДАПТИВНОЕ ПОВЕДЕНИЕ И ЭВОЛЮЦИОННОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

МОСКВА

УДК 001(06)+004.032.26(06)

ББК 72Я5+32.818Я5

М 82

**XVII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
"НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2015": Сборник научных трудов. В 3-х частях.
Ч. 2. М.: НИЯУ МИФИ, 2015. – 212 с.**

Сборник научных трудов содержит доклады, включенные в программу XVII ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ «НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2015», проходившей в г. Москве 19–23 января 2015 г. Тематика конференции охватывает широкий круг вопросов: методические вопросы нейроинформатики, теория нейронных сетей, нейробиология, модели адаптивного поведения и когнитивные исследования, нейронные сети для управления, обработки изображений, временных рядов и другие приложения нейроинформатики.

Во вторую часть включены доклады, посвященные применению нейронных сетей для решения прикладных задач обработки данных, адаптивному поведению и эволюционному моделированию.

Ответственный редактор *А.Г. Трофимов*

Статьи получены до 25 октября 2014 года.

Материалы издаются в авторской редакции.

ISBN 978-5-7262-2044-4

© Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ», 2015

Оригинал-макет подготовлен *Е.Н. Кочубей*

Подписано в печать 20.11.2014. Формат 60×84 1/16.

Печ. л. 13,25. Тираж 150 экз. Заказ № 183.

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Типография НИЯУ МИФИ
115409, Москва, Каширское ш., 31*

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

- Российская академия наук
- Министерство образования и науки Российской Федерации
- Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»
- Российская ассоциация нейроинформатики
- Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)
- Научно-исследовательский институт системных исследований РАН (НИИСИ РАН)
- Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ
- Государственный научный центр РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований (ГНЦ РФ ТРИНИТИ)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – Президент НИЯУ МИФИ Оныкий Б. Н. (НИЯУ МИФИ)
Зам. председателя – Проректор НИЯУ МИФИ Петровский А. Н. (НИЯУ МИФИ)
Сопредседатель – Мишулина О. А. (НИЯУ МИФИ)
Сопредседатель – Тюменцев Ю. В. (МАИ)
Акад. РАН Бетелин В. Б. – НИИСИ РАН, Москва
Акад. РАН Евтушенко Ю. Г. – ВЦ РАН, Москва
Загребаяев А. М. – НИЯУ МИФИ
Трофимов А. Г. – НИЯУ МИФИ
Ушаков В. Л. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Бесчастный Л.Л. – НИЯУ МИФИ
Хапалов В. И. – НИЯУ МИФИ
Ученый секретарь – Бесхлебнова Г. А. (НИИСИ РАН, Москва)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – чл.-корр. РАН Крыжановский Б. В. (НИИСИ РАН, Москва)
Зам. председателя – Дунин-Барковский В. Л. (НИИСИ РАН, Москва)
Зам. председателя – Редько В. Г. (НИИСИ РАН, Москва)
Чл.-корр. РАН Анохин К. В. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Чл.-корр. РАН Балабан П. М. – Институт высшей нервной деятельности
и нейрофизиологии РАН (ИВНД и НФ РАН), Москва
Бурцев М. С. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Введенский В. Л. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Чл.-корр. РАН Величковский Б. М. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Головко В. А. – Брестский государственный технический университет, Республика
Беларусь
Доленко С. А. – НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ
Ежов А. А. – ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Москва
Жданов А. А. – Институт точной механики и вычислительной техники
им. С.А. Лебедева РАН, Москва
Чл.-корр. РАН Иваницкий А. М. – ИВНД и НФ РАН, Москва
Каганов Ю. Т. – МГТУ им. Н. Э. Баумана
Казанович Я. Б. – Институт математических проблем биологии РАН, Пущино, Моск. обл.
Литинский Л. Б. – НИИСИ РАН, Москва
Макаренко Н. Г. – Главная астрономическая обсерватория РАН, Санкт-Петербург
Максимов В. В. – Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН,
Москва
Мишулина О. А. – НИЯУ МИФИ
Нечаев Ю. И. – Научно-исследовательский институт экспериментальной медицины
РАМН, Санкт-Петербург
Прохоров Д. В. – Toyota Research Institute, USA
Чл.-корр. РАН Рудаков К. В. – Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН,
Москва
Самарин А. И. – НИИ нейрокибернетики им. А.Б. Когана, Ростов-на-Дону
Терехов С. А. – ООО «Нейрок Техсофт», Москва
Трофимов А. Г. – НИЯУ МИФИ
Тюменцев Ю. В. – МАИ
Ушаков В. Л. – НИЦ «Курчатовский институт», Москва
Фролов А. А. – ИВНД и НФ РАН, Москва
Шумский С.А. – Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва
Яхно В. Г. – Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород

СПИСОК РЕЦЕНЗЕНТОВ

1. Бесхлебнова Г. А. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
2. Бурцев М. С. – *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва*
3. Васильков В. А. – *НИИ нейрокибернетики им. А.Б. Когана Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*
4. Витяев Е. Е. – *Новосибирский государственный университет*
5. Доленко С. А. – *НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*
6. Дунин-Барковский В. Л. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
7. Ежов А. А. – *Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований (ГНЦ РФ ТРИНИТИ)*
8. Каганов Ю. Т. – *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана*
9. Казанович Я. Б. – *Институт математических проблем биологии РАН, Пушкино, Московская обл.*
10. Карандашев Я. М. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
11. Киселев И. И. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
12. Котов В. Б. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
13. Кошур В. Д. – *Сибирский федеральный университет, Красноярск*
14. Крыжановский В. М. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
15. Литинский Л. Б. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
16. Макаренко Н. Г. – *Главная астрономическая обсерватория РАН, Санкт-Петербург*
17. Мальсагов М. Ю. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
18. Мишулина О. А. – *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

19. Парин С. Б. – *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
20. Полевая С. А. – *Нижегородская государственная медицинская академия*
21. Ратушняк А. С. – *Конструкторско-технологический институт вычислительной техники СО РАН, Новосибирск*
22. Редько В. Г. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
23. Смирнитская И. А. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
24. Соловьева К. П. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
25. Станкевич Л. А. – *Санкт-Петербургский государственный политехнический университет*
26. Тарков М. С. – *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск*
27. Терехов С. А. – *ЗАО «Связной Логистика», Москва*
28. Трофимов А. Г. – *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*
29. Тюменцев Ю. В. – *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)*
30. Ушаков В. Л. – *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва*
31. Чижов А. В. – *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*
32. Шакиров В. В. – *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва*
33. Шапошников Д. Г. – *НИИ нейрокибернетики им. А.Б. Когана Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*
34. Шумский С. А. – *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

Уважаемые коллеги!

Конференция НЕЙРОИНФОРМАТИКА вновь собирает исследователей, работающих по актуальным направлениям теории и приложений искусственных нейронных сетей. Как и на предыдущих наших собраниях, в этом году на конференции НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2015 представлены доклады по проблемам теории нейронных сетей, нейробиологии, моделям адаптивного поведения, нейросетевому моделированию объектов и систем, обработке статистических данных, временных рядов и изображений и многим другим прикладным задачам нейроинформатики.

Более 200 российских ученых и наших зарубежных коллег направили в оргкомитет конференции результаты своих исследований.

По сложившейся традиции конференцию открывают приглашенные доклады. В рамках школы-семинара участники конференции прослушают лекции известных специалистов по актуальным проблемам нейроинформатики. На рабочем совещании участники конференции обсудят теоретические модели в нейробиологии. Особое внимание уделяется работам студентов, аспирантов и молодых специалистов, которые примут участие в творческом конкурсе.

За прошедшие годы российская конференция НЕЙРОИНФОРМАТИКА сложилась как представительный и многоплановый по тематике научный форум. В его работе принимают участие и известные ученые, и молодые специалисты, аспиранты и студенты. Желаем всем участникам конференции плодотворной работы, активного сотрудничества и новых творческих идей.

Оргкомитет

СОДЕРЖАНИЕ

Секция 3

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ, РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ И УПРАВЛЕНИЯ

КОЗЛОВ Д. С., ТЮМЕНЦЕВ Ю. В.

Нейросетевые полуэмпирические модели динамических систем,
описываемых дифференциально-алгебраическими уравнениями 10

ЕГОРЧЕВ М. В.

Обучение полуэмпирической нейросетевой модели полного
углового движения самолета 20

ЕФИТОРОВ А. О., БУРИКОВ С. А., ДОЛЕНКО Т. А.

Сравнение качества решения обратных задач спектроскопии
многокомпонентных растворов нейросетевыми методами
и методом проекции на латентные структуры 31

ГУЩИН К. А., БУРИКОВ С. А., ДОЛЕНКО Т. А.

Понижение размерности данных и оценка качества кластеризации
в задачах анализа состава многокомпонентных растворов 41

ШИРОКИЙ В. Р.

Сравнение нейросетевых моделей прогнозирования геомагнитного
Dst индекса на различных наборах данных и сравнение методов
оценки качества работы моделей 51

СВЕТЛОВ В. А., ПЕРСИАНЦЕВ И. Г., ШУГАЙ Ю. С.

Тестирование новой программной реализации алгоритма
адаптивного построения иерархических нейросетевых
классификаторов 61

СЕНЮКОВА О. В., ЗОБНИН Д. С., ПЕТРЯЙКИН А. В.

Алгоритм сопоставления изображений магнитно-резонансной
томографии головного мозга человека на основе ключевых точек ... 71

КРЫЖАНОВСКИЙ Б. В., ЛИТИНСКИЙ Л. Б.

Общий метод вычисления статистической суммы 81

Стендовая сессия 3

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ, РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ И УПРАВЛЕНИЯ

ИВАНОВ Н. А., ВУЛЬФИН А. М.

Алгоритм на основе нейронной сети для построения модели
языка в статистическом машинном переводчике 92

БОНДАРЕВ В. Н.	
Выделение окрашенных гауссовых сигналов с помощью каскадной нейронной сети	100
БЕКИРЕВ А. С., КЛИМОВ В. В., КУЗИН М. В., ЩУКИН Б. А.	
Выявление мошеннических транзакций на основе построения комитетов нейронных сетей и кластеризации	108
АНИКИН В. И., КАРМАНОВА А. А.	
Моделирование и исследование клеточной нейронной сети Кохонена в электронных таблицах	118
ДОЛЕНКО С. А., МЯГКОВА И. Н., ПЕРСИАНЦЕВ И. Г.	
Нейросетевая сегментация многомерных временных рядов как инструмент для исследования динамики магнитосферы Земли	128
ПРОТАСОВА М. А.	
Нейросетевой классификатор аномалий телекоммуникационной сети	138
ШАЦ В. Н.	
О новой технологии вычислений в машинном обучении	148
КОМАРЦОВА Л. Г., ЛАВРЕНКОВ Ю. Н.	
Применение нейронной сети для анализа характеристик элементов телекоммуникационной сети связи	158
БОНДАРЕВ В. Н.	
Применение цифровой модели импульсного нейрона для адаптивной фильтрации сигналов	169
ПАВЛОВСКИЙ В. Е., САВИЦКИЙ А. В.	
Нейросетевой контроллер для управления квадрокоптером	177

Секция 4

АДАПТИВНОЕ ПОВЕДЕНИЕ И ЭВОЛЮЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

КОШУР В. Д.	
Усиление роевого интеллекта в методе глобальной оптимизации за счёт нейро-нечёткого управления процессом поиска	189
МИШУЛИНА О. А., СУКОНКИН И. Н.	
Эволюционный алгоритм кластеризации данных на основе статистического критерия стандартных объемов кластеров	199
Именной указатель авторов	212

Секция 3

Нейросетевые системы обработки данных, распознавания образов и управления

Д.С. КОЗЛОВ, Ю.В. ТЮМЕНЦЕВ

Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)
dmkozlov001@gmail.com, tium@mai.ru

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ, ОПИСЫВАЕМЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-АЛГЕБРАИЧЕСКИМИ УРАВНЕНИЯМИ

Рассматривается проблема математического и компьютерного моделирования нелинейных управляемых динамических систем, заданных в форме дифференциально-алгебраических уравнений. Предлагается решение данной проблемы в рамках полуэмпирического подхода, объединяющего возможности теоретического и нейросетевого моделирования. Приводятся результаты вычислительного эксперимента по формированию модели для спуска в атмосфере гиперзвукового летательного аппарата.

Ключевые слова: *динамическая система, дифференциально-алгебраические уравнения, полуэмпирическая модель, нейросетевое моделирование.*

D.S. KOZLOV, YU.V. TIUMENTSEV

Moscow Aviation Institute (National Research University)

NEURAL NETWORK BASED SEMI-EMPIRICAL MODELS FOR DYNAMICAL SYSTEMS DESCRIBED BY DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC EQUATIONS

A simulation problem is discussed for nonlinear controlled dynamical systems described by differential-algebraic equations. It is proposed to seek a solution of the problem within the semi-empirical modeling approach combining theoretical knowledge for the plant with training tools of artificial neural network field. The simulation results are presented for a semi-empirical model generated in respect to reentry hypersonic vehicle.

Keywords: *dynamical system, differential-algebraic equations, semiempirical model, neural network based simulation.*

Введение

Многие актуальные задачи могут быть описаны в виде систем дифференциальных уравнений с ограничениями в виде алгебраических соотношений типа равенств (дифференциально-алгебраических уравнений, ДАУ). Круг этих задач обширен: от задач моделирования электрических цепей, химических реакторов, и диффузии до интегрирования уравнений движения механических систем со связями, и подбора оптимального управления [1]. Трудности использования связаны с жесткостью систем ДАУ. Область ДАУ интенсивно развивается, к настоящему времени проработаны эффективные численные методы нахождения решений некоторых типов ДАУ.

При решении прикладных задач в таких областях, как авиация и ракетно-космическая техника, непростой проблемой является построение адекватных моделей управляемых динамических систем. Для объектов моделирования из этих областей характерны высокая сложность, многомерность, нелинейность, и нестационарность. Чаще всего модели движения таких объектов записываются в форме обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Однако в ряде случаев помимо ОДУ модель включает связи алгебраического типа, как, например, в задаче управления спуском космического челнока в атмосфере [1], в которой требуется учесть ограничения на значения переменных состояния по тепловым нагрузкам. В таких случаях вместо ОДУ требуется использовать ДАУ.

Сложным нелинейным динамическим системам как объектам моделирования обычно сопутствует неполное и неточное знание их характеристик и свойств, а также условий, в которых система будет действовать. Вследствие этого, актуальной является разработка средств моделирования таких систем, позволяющих получать модели, обладающие адаптивностью, т.е. способностью подстраиваться под различные неопределенности в описании исходного объекта и условий его функционирования.

Одними из первых для построения настраиваемых моделей управляемых динамических систем были использованы сети NARX (Non-linear autoregressive network with exogenous inputs), гетерогенные NARX и NARMAX (Nonlinear autoregressive with moving average and exogenous inputs) [2,3]. Данные нейросетевые модели имеют чисто эмпирический характер («черный ящик»), основываются только на экспериментальных данных о поведении системы. Наличие обратных связей и линий задержки

позволяет этим сетям работать с временными последовательностями и реализовывать нелинейное отображение входных данных в выходные. Основным недостатком этих сетей является то, что они не позволяют выполнять долгосрочный прогноз поведения моделируемого объекта.

В качестве альтернативы сетям типа NARX в [4] были предложены нейросетевые модели, в которых правые части системы ОДУ аппроксимируются с помощью многослойного персептрона. Переменные состояния системы представляются контекстными нейронами, к которым приходят обратные связи от выходного слоя персептрона. Весовые коэффициенты контекстных нейронов не изменяются при обучении. В архитектуре сети реализована разностная схема Эйлера первого порядка.

Развитием данного подхода являются сети Рунге–Кутты [5]. В структуре сети в явном виде реализуется явный метод Рунге–Кутты четвертого порядка. Правые части исходной ОДУ аппроксимируются с помощью сетей радиальных базисных функций. В соответствии с разностной схемой сети для правых частей продублированы четыре раза. К недостаткам данного подхода можно отнести то, что требуется производить обучение единой нейросетевой модели, содержащей и нейросетевые модели правых частей и их копии.

При формировании сетей Эйлера и Рунге–Кутты использовалась информация о методах интегрирования исходной системы. Это можно интерпретировать как учет в модели теоретических знаний из области вычислительной математики. В [6] предложены полуэмпирические модели, позволяющие учесть также и теоретические знания об объекте моделирования. Полуэмпирический подход предполагает формирование моделей типа «серый ящик», сочетающих использование теоретических знаний об объекте моделирования и возможность улучшения модели по экспериментальным данным. В качестве теоретических знаний используются дифференциальные уравнения исходной системы (ОДУ), а также способы их интегрирования. Методы улучшения модели используют аппарат искусственных нейронных сетей. Отличием полуэмпирического подхода от NARX является то, что при формировании часть связей между переменными состояния и управления исходной системы ОДУ без изменений встраивается в модель. Это позволяет сократить число настраиваемых параметров модели и повысить ее обобщающие свойства. На одном и том же обучающем наборе полуэмпирическая модель по сравнению с NARX демонстрирует существенно более высокую точность [6].

Характерная особенность подхода, описанного в [6], состоит в том, что формирование полуэмпирической модели основано в нем на явных, условно устойчивых схемах численного интегрирования. По этой причине,

непосредственно для полуэмпирического моделирования систем, описываемых ДАУ, данный подход использовать не представляется возможным. Необходима его модификация, которая учитывала бы специфику ДАУ. Ниже демонстрируется, каким образом может быть выполнена такая модификация.

Постановка задачи

В общем виде система дифференциально-алгебраических уравнений в неявной форме может быть записана следующим образом

$$\begin{aligned} F(t, y, \dot{y}, z) &= 0, \\ y(t_0) &= y_0, \quad z(t_0) = z_0. \end{aligned} \quad (1)$$

В системе ДАУ (1) матрица $\frac{\partial F(t, y, \dot{y}, z)}{\partial \dot{y}}$ является невырожденной.

Для системы (1) вводится понятие индекса, понимаемого как «наименьшее число аналитических дифференцирований, требующихся для того, чтобы путем алгебраических преобразований из ДАУ получить систему ОДУ явного вида ОДУ явного вида $\dot{y} = \Psi(t, y, z)$, именуемую «скрытой ОДУ» [7].

Рассмотрим систему дифференциально-алгебраических уравнений (1) в полужавной (semi-explicit) форме:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= h(t, x, y, z, u), \\ \dot{y} &= f(t, x, y), \\ 0 &= g(t, y), \end{aligned} \quad (2)$$

где $x = x(t)$, $y = y(t)$ – переменные состояния системы, x и h имеют размерность равную l_1 , y и f имеют размерность равную l_2 ; $z = z(t)$ – алгебраические переменные ДАУ, которые также являются переменными состояния системы (2), z и g имеют размерность равную m : $m \leq \min(l_1, l_2)$, $u = u(t)$ – управляющие переменные. Система (2) имеет индекс равный 3, если произведение матриц $\frac{\partial g}{\partial y} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial h}{\partial z}$ является невырожденной матрицей

для любого t .

Одним из основных численных методов решения систем ДАУ является линейный многошаговый метод дифференцирования назад (backward differentiation formulas, BDF) [8]. В k -шаговом методе BDF выполняется аппроксимация производных переменных состояния полиномом, исполь-

зующим значения, полученных на предыдущих $(k-1)$ шагах. С учетом этого система ДАУ в полужаной форме (2) имеет вид:

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^k \alpha_i \mathbf{x}_{n-i} &= h\beta_0 \mathbf{h}(t_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{z}_n, \mathbf{u}_n), \\ \sum_{i=0}^k \alpha_i \mathbf{y}_{n-i} &= h\beta_0 \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{w}_n), \\ 0 &= \mathbf{g}(t_n, \mathbf{y}_n),\end{aligned}\tag{3}$$

где h – шаг численного интегрирования, α_i, β_i – коэффициенты метода, $\mathbf{x}_{n-i}, \mathbf{y}_{n-i}$ – значения переменных состояния, полученные на t_{n-i} шаге. Метод BDF является чисто неявным методом, значения коэффициентов подбираются исходя из условий на порядок аппроксимации для линейных многошаговых разностных методов. Использование неявной схемы предполагает решение системы нелинейных уравнений на каждом шаге интегрирования. В методе BDF для этого используется метод Ньютона [8]. При $k = 1$ метод BDF становится неявным методом Эйлера. Метод BDF порядка $k > 6$ является неустойчивыми по начальным данным [1].

Метод BDF может использоваться для решения жестких задач. При $k \leq 2$ метод BDF является A-устойчивым, при $3 \leq k \leq 6$ метод можно отнести к A(α)-устойчивым. В [1] приведены условия сходимости метода BDF порядка $k < 7$ с постоянным шагом интегрирования. Для нелинейных систем ДАУ в форме (2) метод BDF сходится и имеет порядок точности $O(h^k)$, если начальные погрешности являются величинами $O(h^k)$ и метод Ньютона на каждом шаге имеет погрешность аппроксимации $O(h^{k+1})$.

Целью работы является реализация метода формирования и настройки полумпирических моделей в виде модульных нейронных сетей для динамических систем, записанных в форме системы ДАУ индекса 1 и 2. В полумпирической модели должен быть реализован метод BDF.

Полумпирические модели для систем ДАУ

Формирование полумпирической НС-модели состоит из следующих шагов [6]:

1) формирование теоретической модели для исследуемой динамической системы, сбор доступных экспериментальных данных о поведении этой системы;

2) оценка точности теоретической модели на доступных данных, в случае недостаточной ее точности выдвижение гипотез о причинах и возможных путях их устранения;

- 3) преобразование исходной системы с непрерывным временем в систему с дискретным временем;
- 4) формирование нейросетевого представления для полученной системы с дискретным временем;
- 5) обучение нейросетевой модели;
- 6) оценка точности обученной нейросетевой модели;
- 7) корректировка, в случае недостаточной точности, нейросетевой модели путем внесения в нее структурных изменений.

Структурная схема полуэмпирической модели, реализующей метод BDF, приведена на рис. 1. Модель генерируется в соответствии с алгоритмом [9]. Все генерируемые полуэмпирические модели имеют унифицированное представление в виде нейронной сети с линиями задержки и обратными связями к нейронам первого слоя. На вход сети подается управляющий сигнал. Значения переменных состояния, полученные на предыдущих шагах, сохраняются в модели с помощью линий задержки. Выходами сети являются значения переменных состояния исходной системы.

В структуре сети учитываются связи между переменными состояния исходной системы ДАУ. Каждая правая часть уравнений системы ДАУ записывается в отдельном слое сети. В сети выполняется разделение переменных: в каждый слой подаются только те значения, которые соответствуют переменным в правых частях моделируемого уравнения.

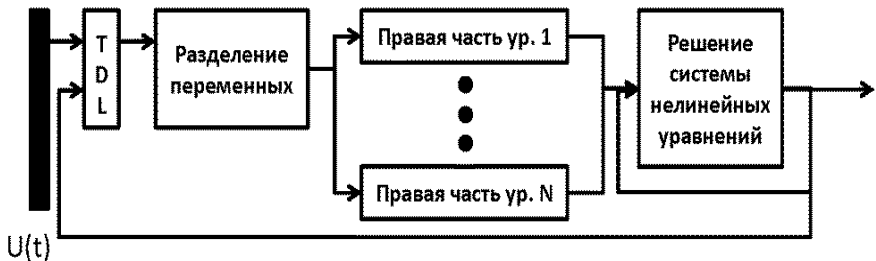


Рис. 1. Структурная схема полуэмпирической модели:

$U(t)$ – управляющий сигнал; TDL – линия задержек; структурные элементы задают один или несколько слоев сети

В соответствии с формулой (4) внутри сети организуется итерационный процесс, который заканчивается при достижении $\|p^{(n)}\| < \varepsilon$, $\varepsilon = 10^{-8}$,

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} - [J(p, h)]^{-1} Q(p^{(n)}). \quad (4)$$

Аппроксимация матрицы Якоби выполняется с помощью центральных разностей

$$J(p, \omega) = \left[\frac{Q_i(p_1, \dots, p_j + \omega, \dots, p_n) - Q_i(p_1, \dots, p_j - \omega, \dots, p_n)}{2\omega} \right]_{i,j=1}^P, \quad (5)$$

где

$$Q(p) = \begin{pmatrix} 0 = h\beta_0 h(t_n, x_n, y_n, z_n, u_n) - \sum_{i=0}^k \alpha_i x_{n-i} \\ 0 = h\beta_0 f(t_n, y_n, w_n) - \sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n-i} \\ 0 = g(t_n, y_n) \end{pmatrix},$$

$p = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \end{pmatrix}$, размерностью $P = l_1 + l_2 + m$, $\omega = 10^{-8}$ – шаг аппроксимации

матрицы Якоби.

Обучение сети производится с использованием алгоритма RTRL (Real-Time Recurrent Learning). Весовые коэффициенты, относящиеся к схеме интегрирования, «замораживаются» и не изменяются при обучении. Элементы сети, относящиеся к решению системы нелинейных уравнений, при обучении не задействуются. В слои, реализующие правые части уравнений исходной ДАУ, встраиваются отдельные НС-модули, соответствующие тем частям исходной модели, которые требуют настройки. Эти НС-модули в процессе формирования полуэмпирической модели подвергаются структурной и параметрической корректировке.

Обучающая выборка, требуемая для выполнения корректировки, формируется как последовательность наблюдаемых выходов для заданного управления и начальных условий. При этом используется случайный входной управляющий сигнал специфического вида, определяющий, наряду с начальными условиями, поведение моделируемого объекта.

Вычислительный эксперимент

Для оценки работоспособности предложенного подхода рассмотрим задачу $(\alpha\gamma)$ -управления спуском космического челнока в верхних слоях атмосферы. Уравнения движения летательного аппарата (ЛА) имеют следующий вид [10]:

$$\begin{aligned}
\dot{h} &= V \sin(\theta), \\
\dot{\lambda} &= \frac{V \cos(\theta) \sin(\psi_c)}{r \cos(\varphi)}, \\
\dot{\varphi} &= \frac{V}{r} \cos(\theta) \cos(\psi_c), \\
\dot{V} &= \frac{-X_a}{m} - g \sin(\theta) - \Omega_3^2 r \cos(\varphi) (\sin(\varphi) \cos(\psi_c) \cos(\theta) - \cos(\varphi) \sin(\theta)), \\
\dot{\theta} &= \frac{Y_a \cos(\gamma)}{mV} + \frac{\cos(\theta)}{V} \left(\frac{V^2}{r} - g \right) + 2\Omega_3^2 \cos(\theta) \sin(\psi_c) + \\
&+ \frac{\Omega_3^2 r \cos(\varphi)}{V} (\sin(\varphi) \cos(\psi_c) \sin(\theta) + \cos(\varphi) \cos(\theta)), \\
\dot{\psi}_c &= \frac{Y_a \sin(\gamma)}{mV \cos(\theta)} + \frac{V}{r} \cos(\theta) \sin(\psi_c) \tan(\varphi) - \\
&- 2\Omega_3 (\cos(\varphi) \cos(\psi_c) \tan(\theta) - \sin(\varphi)) + \frac{\Omega_3^2 r \cos(\varphi)}{V \cos(\theta)} \cos(\varphi) \sin(\varphi) \sin(\psi_c),
\end{aligned} \tag{6}$$

где h – высота относительно уровня моря, м; $r = h + R_3$ – расстояние от центра Земли до центра масс ЛА, м; R_3 – радиус Земли, м; λ – долгота, град.; φ – широта, град; V – величина вектора скорости V , м/с; θ – угол между вектором скорости и местной горизонтальной плоскостью, град; ψ_c – угол между проекцией скорости на местную горизонтальную плоскость и касательной к параллели, град.; γ – угол крена, град; α – угол атаки, град; Ω_3 – угловая скорость вращения Земли, рад/с; $g = \frac{\mu}{r^2}$ – геопотенциальная функция; μ – гравитационная постоянная Земли, м³/с²; m – масса ЛА, кг; $Y_a = 0,5\rho C_{ya} S V^2$ – аэродинамическая подъемная сила; $C_{ya} = C_{ya}(\alpha)$ – коэффициент подъемной силы; $X_a = 0,5\rho C_{xa} S V^2$ – аэродинамическая сила лобового сопротивления; $C_{xa} = C_{xa}(\alpha)$ – коэффициент лобового сопротивления; $\rho = \rho(h)$ – плотность атмосферы на высоте h ; S – площадь крыла ЛА, м².

Переменные состояния системы $\{h, \lambda, \varphi, \}$ измеряются в геоцентрической экваториальной системе координат, переменные $\{V, \theta, \psi_c\}$ измеряются в скоростной системе координат.

Предлагается упрощенная модель, в которой сила тяга двигателей равна 0, а коэффициент лобового сопротивления считается постоянным $C_{xa} = C_{xa}^*$. При выполнении спуска космического челнока необходимо вы-

полнение траекторных ограничений, чтобы избежать перегрева. Для определенного участка траектории эта проблема может быть решена формированием алгебраического соотношения между величиной лобового сопротивления и относительной скоростью ЛА, основанного на полиномиальной аппроксимации. Если для текущих величин лобового сопротивления и относительной скорости это соотношение выполняется, то температурные ограничения не нарушаются. Вследствие этого система (6) дополняется алгебраическим равенством вида:

$$\frac{X_a}{m} - [C_0 + C_1(V - V_0) + C_2(V - V_0)^2 + C_3(V - V_0)^3] = 0, \quad (7)$$

где $V_0 = V(t_0)$ – значение начальной скорости ЛА; C_i – константы полиномиальной аппроксимации.

В системе ДАУ переменными состояния являются $\{h, \lambda, \varphi, V, \theta, \psi_C, \gamma\}$, γ – алгебраическая переменная ДАУ, α – управляющая переменная. В соответствии с видом системы (6)-(7), ее можно классифицировать как систему ДАУ индекса 3.

Требуется провести восстановление зависимости для коэффициента C_{ya} . В обучающем наборе в качестве входных данных используются последовательности значений угла атаки специального вида. Выходными данными являются соответствующие последовательности значений ψ_C . Для упрощения задачи значения γ , на которые также влияет изменение C_{ya} , не рассматриваются. Характерной особенностью задачи является то, что при выполнении данного маневра допустимо, т.е. не нарушает ограничения (7), изменение α в ограниченном диапазоне, что вызывает изменение величины C_{ya} для этого диапазона на 5%.

Вычислительный эксперимент проводился на временном интервале $t \in [332, 496]$ с шагом дискретизации $\Delta t = 0,4$ с. Начальные условия: $h = 80480$ м, $\lambda = 177,7^\circ$, $\varphi = 32^\circ$, $V = 7412$ м/с, $\theta = -0,75^\circ$, $\psi_C = 62,788^\circ$, $\gamma = 41,1^\circ$, $\alpha \in [35^\circ, 40^\circ]$. Значения констант моделирования приведены в [10]. Для реализации уравнений движения (6) применялась полуэмпирическая модель, реализующая метод BDF 1-го порядка. В качестве нейросетевого модуля для C_{ya} использовалась сеть персептронного типа с 10 нейронами в скрытом слое. На рис. 2 приведены значения угла атаки из экзаменационного набора, рассчитанные с помощью полуэмпирической модели значения ψ_C , а также соответствующая погрешность E воспроизведения значений ψ_C . СКО для обучающего, тестового и экзаменационного наборов составило соответственно $4.192 \cdot 10^{-5}$, $5.23 \cdot 10^{-5}$, $6.442 \cdot 10^{-5}$.

Реализация полуэмпирических моделей, а также проведение вычислительного эксперимента выполнялись средствами системы MATLAB R2009a с помощью пакета Neural Network Toolbox.

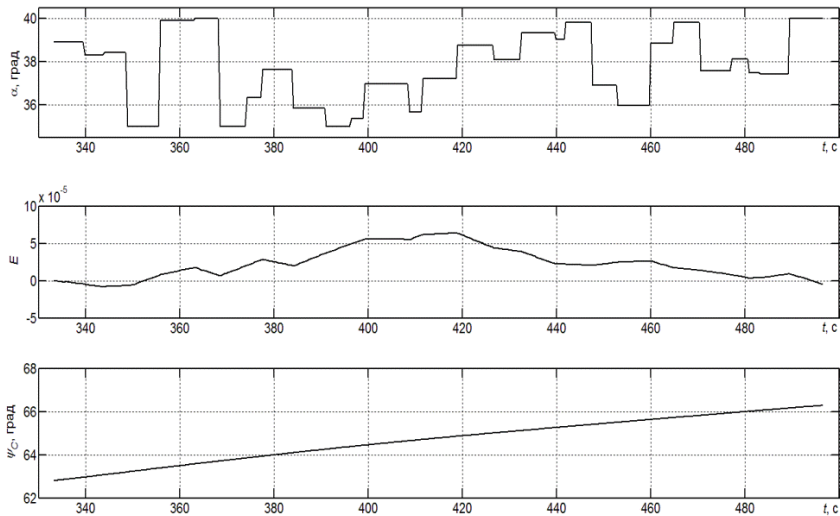


Рис. 2. Результаты вычислительного эксперимента:

α – задающий сигнал по углу атаки; ψ_C – угол между проекцией скорости на местную горизонтальную плоскость и касательной к параллели;

E – погрешность воспроизведения ψ_C

Выводы

Предложен метод формирования и настройки полуэмпирических моделей в виде нейронных сетей с модульной архитектурой для динамических систем, записанных в форме дифференциально-алгебраических уравнений. Предложена реализация неявного численного метода интегрирования систем дифференциальных уравнений внутри полуэмпирической нейросетевой модели, ранее не описанная в литературе.

Полученные результаты показывают, что полуэмпирический подход пригоден для моделирования сложных динамических объектов, теоретическая модель движения которых имеет вид системы дифференциально-алгебраических уравнений.

Список литературы

1. Brenan K.E., Campbell S.L., Petzold I.R. Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations // Classics in applied mathematics. Philadelphia: SIAM. 1996.

2. Козлов Д.С., Тюменцев Ю.В. Применение неоднородных NARX-сетей для обнаружения отказных ситуаций // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 2012. No. 9. С. 13-22.
3. Chen S., Billings S.A. Representation of non-linear systems: the NARMAX model // International Journal of Control, 1989. V. 49. No. 3. P. 1012-1032.
4. Coryn A., Bailer-Jones C., MacKay D. A recurrent neural network for modelling dynamical systems // Network: Computation in Neural Systems, 1998. No 9. P. 531–547.
5. Wang Y-J, Lin C-T. Runge-Kutta neural network for identification of dynamical systems in high accuracy // IEEE Trans. on Neural Networks, 1998. V. 9. No. 2. P. 294-307.
6. Егорчев М.В., Козлов Д.С., Тюменцев Ю.В., Чернышев А.В. Нейросетевые полупэмпирические модели управляемых динамических систем // Вестник информационных и компьютерных технологий. 2013. No. 9. С. 3-10.
7. Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Пер. с англ. М: Мир. 1999. 685 с.
8. Gear C.W. Simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations // IEEE Trans. Circuit Theory, 1971. CT-18. No. 1. P. 89-95.
9. Козлов Д.С., Тюменцев Ю.В. Метод автоматической генерации полупэмпирических нейросетевых моделей // XII Всероссийская научная конференция «Нейрокомпьютеры и их применение». Тезисы докладов. М.: ГБОУ ВПО МГППУ, 2014. С. 65-66.
10. Brenan K.E. Numerical simulation of trajectory prescribed path control problem by the backward differentiation formulas // IEEE Trans. Automat. Control, 1986. V. AC-31. No. 3. P. 266-269.

М.В. ЕГОРЧЕВ

Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)
mihail.egorchev@gmail.com

ОБУЧЕНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ ПОЛНОГО УГЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ САМОЛЕТА*

Рассматривается проблема математического и компьютерного моделирования управляемого движения самолета при недостаточности знаний об объекте моделирования и условиях его работы. Цель работы состоит в

* Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по проекту № 865.

развитии класса модульных полуэмпирических динамических моделей, объединяющих возможности теоретического и нейросетевого моделирования. Рассмотрена процедура обучения таких моделей выполнению многошагового прогноза.

Ключевые слова: *нелинейная динамическая система, полуэмпирическая модель, нейросетевое моделирование, последовательная процедура обучения.*

M.V. EGORCHEV

Moscow Aviation Institute (National Research University)

TRAINING OF NEURAL NETWORK BASED SEMI-EMPIRICAL MODELS FOR SPATIAL AIRCRAFT MOTION

A simulation approach is discussed for controlled aircraft motion under multiple and diverse uncertainties including knowledge imperfection concerning simulated plant and its environment exposure. The main goal of the paper is an advance on semi-empirical dynamical models combining theoretical knowledge for the plant with training tools of artificial neural network field. Training of the dynamical neural network model for multi-step ahead prediction is performed in a sequential fashion.

Keywords: *nonlinear dynamical system, semi-empirical model, neural network based simulation, sequential training procedure.*

Введение

Свойства летательных аппаратов (ЛА) в процессе их функционирования могут изменяться заранее непредсказуемым образом. Этот фактор должен учитываться в моделях, используемых в составе бортовых систем ЛА. Один из путей решения данной проблемы состоит в формировании моделей, обладающих адаптивностью.

Требуемую адаптивную модель можно, в частности, получить с использованием предложенного в [1] полуэмпирического подхода, позволяющего сочетать теоретические знания об объекте моделирования с улучшением модели на основе экспериментальных данных, и обеспечивающего значительное повышение точности решения по сравнению с тра-

традиционными чисто эмпирическими моделями, такими как модель NARX. При этом теоретические знания представляются в виде системы дифференциальных уравнений, а методы улучшения модели основываются на аппарате искусственных нейронных сетей (НС). Вопросы, связанные с выработкой управляющих воздействий, обеспечивающих адекватное отражение особенностей поведения моделируемой системы в обучающем наборе, были рассмотрены в [2].

Обучение полуэмпирической НС-модели представляет собой непростою задачу в силу специфики данной модели как динамической нейронной сети. В следующих разделах приведена специальная процедура обучения сети выполнению многошагового прогноза. Эффективность предлагаемого подхода иллюстрируется результатами соответствующих вычислительных экспериментов.

Формирование полуэмпирической модели углового движения

Для оценки работоспособности предлагаемого подхода рассмотрим задачу моделирования полного углового движения самолета, которое описывается с помощью системы уравнений, традиционной для динамики полета самолетов [3]. Данная система состоит из четырнадцати обыкновенных дифференциальных уравнений, ее запись, в силу громоздкости, не приводится в данной работе. Переменными состояния соответствующей динамической системы являются: $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ – угловые скорости крена, рысканья и тангажа, град/с; γ, ψ, ϑ – углы крена, рысканья и тангажа, град; α, β – углы атаки и скольжения, град; $\delta_B, \delta_H, \delta_\varepsilon$ – углы отклонения управляемого стабилизатора, руля направления и элеронов, град; $\dot{\delta}_B, \dot{\delta}_H, \dot{\delta}_\varepsilon$ – угловые скорости отклонения управляемого стабилизатора, руля направления и элеронов, град/с. Управлениями являются величины $\delta_{B_{act}}, \delta_{H_{act}}, \delta_{\varepsilon_{act}}$ – командные сигналы на приводы управляемого стабилизатора, руля направления и элеронов, град.

Данная теоретическая модель содержит шесть неизвестных нелинейных функций многих переменных, описывающих зависимости коэффициентов аэродинамических сил и моментов от переменных состояния:

$$C_x(\alpha, \beta, \delta_B, \omega_z), C_y(\alpha, \beta, \delta_B, \omega_z), C_z(\alpha, \beta, \delta_H, \delta_\varepsilon, \omega_x, \omega_y), \\ m_x(\alpha, \beta, \delta_B, \delta_H, \delta_\varepsilon, \omega_x, \omega_y), m_y(\alpha, \beta, \delta_B, \delta_H, \delta_\varepsilon, \omega_x, \omega_y), m_z(\alpha, \beta, \delta_B, \omega_z).$$

В формируемую полуэмпирическую модель для представления этих функций включены шесть НС-модулей в виде сигмоидальных НС прямо-

го распространения с одним скрытым слоем. Скрытые слои включают 1, 3, 5, 5, 5 и 10 нейронов для модулей C_x , C_y , C_z , m_x , m_y и m_z , соответственно. Отметим, что поскольку в модели отсутствуют органы управления, воздействующие на разгон/торможение вдоль продольной оси ЛА, нет возможности получить обучающее множество для НС-модуля, представляющего коэффициент аэродинамического сопротивления C_x . По этой причине НС-модуль для C_x формируется автономно на основе данных из [4], вставляется в формируемую полуэмпирическую НС-модель и «замораживается», т.е. на варьирование его настраиваемых параметров накладывается запрет.

При формировании обучающего набора, а также при тестировании полученной полуэмпирической НС-модели управляющие воздействия на самолет осуществлялись одновременно по всем трем каналам, при этом сигналы $\delta_{B_{act}}$, $\delta_{H_{act}}$, $\delta_{\vartheta_{act}}$ формировались как полигармонические для получения обучающего набора и как случайные – при тестировании обученной модели.

Вычислительный эксперимент с теоретической моделью проводился для временного интервала $t \in [0, 20]$ с при получении данных для обучения НС-модели и $t \in [0, 40]$ с при тестировании полученной НС-модели, в обоих случаях с шагом дискретизации $\Delta t = 0.02$ с для частично наблюдаемого вектора состояния $y(t) = [\alpha(t); \beta(t); \omega_x(t); \omega_y(t); \omega_z(t)]^T$. На выход системы $y(t)$ воздействует аддитивный белый шум со среднеквадратичным отклонением (СКО) $\sigma_\alpha = \sigma_\beta = 0.02$ град, $\sigma_{\omega_x} = 0.1$ град/с, $\sigma_{\omega_y} = \sigma_{\omega_z} = 0.05$ град/с. Если НС-модель абсолютно точно воспроизводит исходную систему, ошибка моделирования полностью определяется шумом, воздействующим на выход системы. Следовательно, сопоставление ошибки моделирования с СКО шума позволяет судить о том, насколько успешно решена задача моделирования, а СКО шума можно принять за целевое значение ошибки моделирования.

Обучение на выборке $\{y_i\}$, $i = 1, \dots, N$, полученной с помощью исходной теоретической модели, проводится в системе Matlab для сетей в форме LDDN (Layered Digital Dynamic Networks) с использованием алгоритма Левенберга-Марквардта по критерию среднеквадратичной ошибки модели. Матрица Якоби вычисляется по алгоритму RTRL (Real-Time Recurrent Learning) [5].

Процедура обучения полуэмпирической модели

В работе [6] было показано, что при наличии аддитивного шума, воздействующего на наблюдаемые выходы динамической системы, теоретически оптимальной моделью является рекуррентная нейронная сеть. Однако процесс обучения таких сетей на длинных входных последовательностях сопряжен с определенными затруднениями: наличием ложных долин в поверхности ошибки [7], эффектами экспоненциального уменьшения либо роста нормы градиента [8], возможным неограниченным ростом выходов сети. По этим причинам лишь для небольшого набора начальных значений параметров сети удастся найти глобальный минимум с помощью градиентных методов оптимизации.

Если перейти к решению задачи поиска начальных значений параметров, достаточно близких к минимуму, то можно предположить, что они являются решениями схожих задач. То есть требуется найти такую последовательность задач, что: первая задача является достаточно простой – и ее решение может быть найдено для любых начальных значений параметров; каждая последующая задача схожа с предыдущей – их решения близки в пространстве значений параметров; последовательность сходится к исходной, требуемой задаче.

Последовательно обучая сеть на данных задачах, можно надеяться достигнуть достаточно глубокого минимума. Подходы, основанные на схожих идеях, предлагались и ранее [9–12]: как правило, предполагалось обучение сети на последовательности задач возрастающей сложности (хотя это, по-видимому, не является обязательным требованием). Применение такого рода алгоритмов в большинстве случаев приводило к значительному улучшению результатов обучения. В данном случае, для задачи многошагового прогноза, естественным образом можно предложить следующую последовательность задач: задача одношагового прогноза; задача двухшагового прогноза; ...; задача N -шагового прогноза.

Очевидно, первая задача является наиболее простой – более того, при ее решении рекуррентная сеть будет обучаться как обычная сеть прямого распространения. Требуемая задача N -шагового прогноза является наиболее сложной, поскольку обучение сети будет производиться на наиболее длинной последовательности. Итак, целевая функция для задачи прогноза на k шагов будет иметь следующий вид:

$$J_k(\{x_i, u_i\}_{i=1}^n, w) = \frac{1}{k(n-k)} \sum_{i=1}^{n-k} \sum_{j=1}^k \|x_{i+j} - \text{net}(\dots \text{net}(x_i, u_i; w), \dots, u_{i+j-1}; w)\|,$$

где x_i – вектор переменных состояния в дискретный момент времени i ; u_i – вектор переменных управления в дискретный момент времени i ; w – вектор настраиваемых параметров НС-модели.

В табл. 1 представлено описание процедуры обучения НС-модели.

Таблица 1

Алгоритм обучения НС-модели

Шаг	Действие
1	Подготовить обучающее множество $X^{train} \leftarrow \{x_i^{train}, u_i^{train}\}_{i=1}^n$ и контрольное множество $X^{val} \leftarrow \{x_i^{val}, u_i^{val}\}_{i=1}^n$, выбрать значение целевой точности ε^{goal}
2	Выбрать значение максимально допустимого роста погрешности Δ^{max}
3	Выбрать значение максимально допустимого числа эпох с ростом погрешности на контрольном множестве s^{max}
4	Выбрать начальные значения параметров w_0 (например, случайные)
5	Установить текущее число эпох с ростом погрешности на контрольном множестве $s \leftarrow 0$ и текущее число шагов прогноза $k \leftarrow 1$
6	Решить задачу оптимизации $w_1 \leftarrow \underset{w}{\operatorname{argmin}} J_1(X^{train}, w)$, $\varepsilon_1^{train} \leftarrow J_1(X^{train}, w_1)$
7	Если $\varepsilon_1^{train} > \varepsilon^{goal}$, то вернуться к шагу 4
8	Вычислить погрешность $(n-1)$ -шагового прогноза на контрольном множестве $\varepsilon_1^{val} \leftarrow J_{n-1}(X^{val}, w_1)$
9	Установить новое число шагов прогноза $k^+ \leftarrow k$
10	До тех пор, пока $k^+ \leq n-1$ и $\varepsilon_{k^+}^{train} < \varepsilon_k^{train} + \Delta^{max}$, делать $k^+ \leftarrow k^+ + 1$
11	Если $k^+ = k$, то вернуться к шагу 4
12	Решить задачу оптимизации $w_{k^+} \leftarrow \underset{w}{\operatorname{argmin}} J_{k^+}(X^{train}, w)$, $\varepsilon_{k^+}^{train} \leftarrow J_{k^+}(X^{train}, w_{k^+})$
13	Если $\varepsilon_{k^+}^{train} > \varepsilon^{goal}$, установить $k^+ \leftarrow k^+ - 1$ и вернуться к шагу 11
14	Вычислить погрешность $(n-1)$ -шагового прогноза на контрольном множестве $\varepsilon_{k^+}^{val} \leftarrow J_{n-1}(X^{val}, w_{k^+})$
15	Если $\varepsilon_{k^+}^{val} > \varepsilon_k^{val}$, установить $s \leftarrow s + 1$
16	Если $s \geq s^{max}$, то вернуться к шагу 4
17	Если $k^+ < n-1$, установить $k \leftarrow k^+$, иначе закончить: w_{n-1} – искомые параметры НС-модели

На рис. 1 показана поверхность ошибки задачи многошагового прогноза для демонстрационного примера с одним настраиваемым параметром w , а также отмечено начальное значение параметра и локальный минимум.

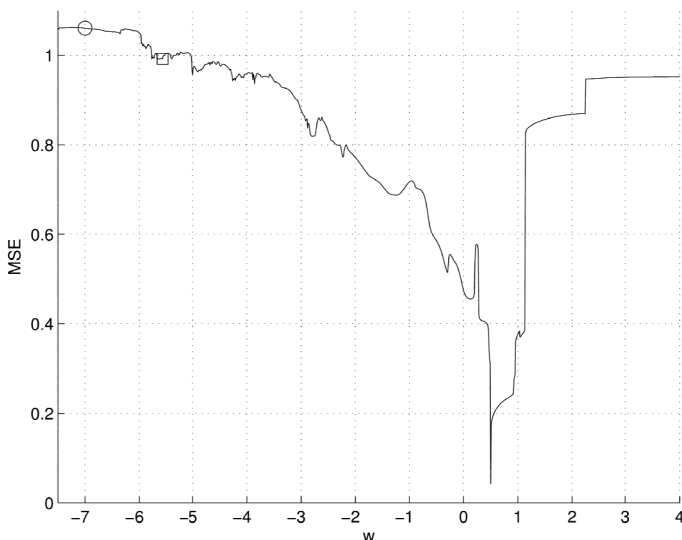


Рис. 1. Линией показана поверхность ошибки демонстрационной задачи, кругом – начальное значение параметра, а квадратом – достигнутый локальный минимум

В свою очередь, на рис. 2 показаны поверхности ошибки последовательности задач многошагового прогноза, а также соответствующие минимумы, достигнутые с помощью того же метода градиентного спуска с тем же начальным значением w . Можно видеть, что данный подход обеспечил возможность достижения глобального минимума исходной задачи. Также стоит отметить, что в реальных многомерных задачах проблема локальных минимумов является еще более критичной, а преимущества последовательного обучения более важными. Данный алгоритм был успешно применен к сформулированной выше задаче идентификации аэродинамических коэффициентов для выполнения прогноза на 1000 шагов. Результаты решения данной задачи представлены в табл. 2 и на рис. 3. Анализ полученных результатов моделирования позволяет сделать следующие выводы.

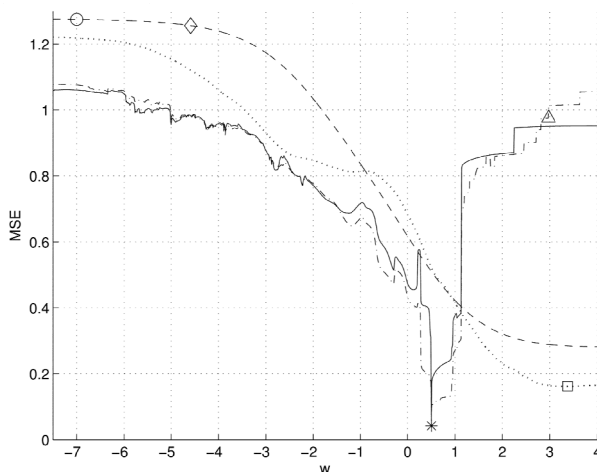


Рис. 2. Штриховой, пунктирной, штрихпунктирной и сплошной линиями показаны поверхности ошибки задач прогноза на 2, 7, 148 и 199 шагов, кругом – начальное значение параметра, а ромбом, квадратом, треугольником и звездочкой – достигнутые минимумы

Таблица 2

Ошибка моделирования на тестовом множестве для полуэмпирической модели на различных стадиях обучения

Кол-во шагов прогноза	$СКО_{\alpha}$	$СКО_{\beta}$	$СКО_{\omega_x}$	$СКО_{\omega_y}$	$СКО_{\omega_z}$
2	0.1376	0.2100	1.5238	0.4523	0.4517
4	0.1550	0.0870	0.5673	0.2738	0.4069
6	0.1647	0.0663	0.4270	0.2021	0.3973
9	0.1316	0.0183	0.1751	0.0530	0.2931
14	0.0533	0.0109	0.1366	0.0300	0.1116
21	0.0171	0.0080	0.0972	0.0193	0.0399
1000	0.0171	0.0080	0.0972	0.0193	0.0399

Определяющими для сформированной модели являются ее обобщающие свойства, под которыми традиционно для НС-модели понимается ее способность обеспечивать требуемый уровень точности не только для данных, на которых модель обучалась, но и для любых значений и сочетаний значений управляющих и фазовых переменных в пределах области их определения. Такого рода проверка осуществляется на тестовых данных, покрывающих упомянутую область определения и не совпадающих с обучающими данными.

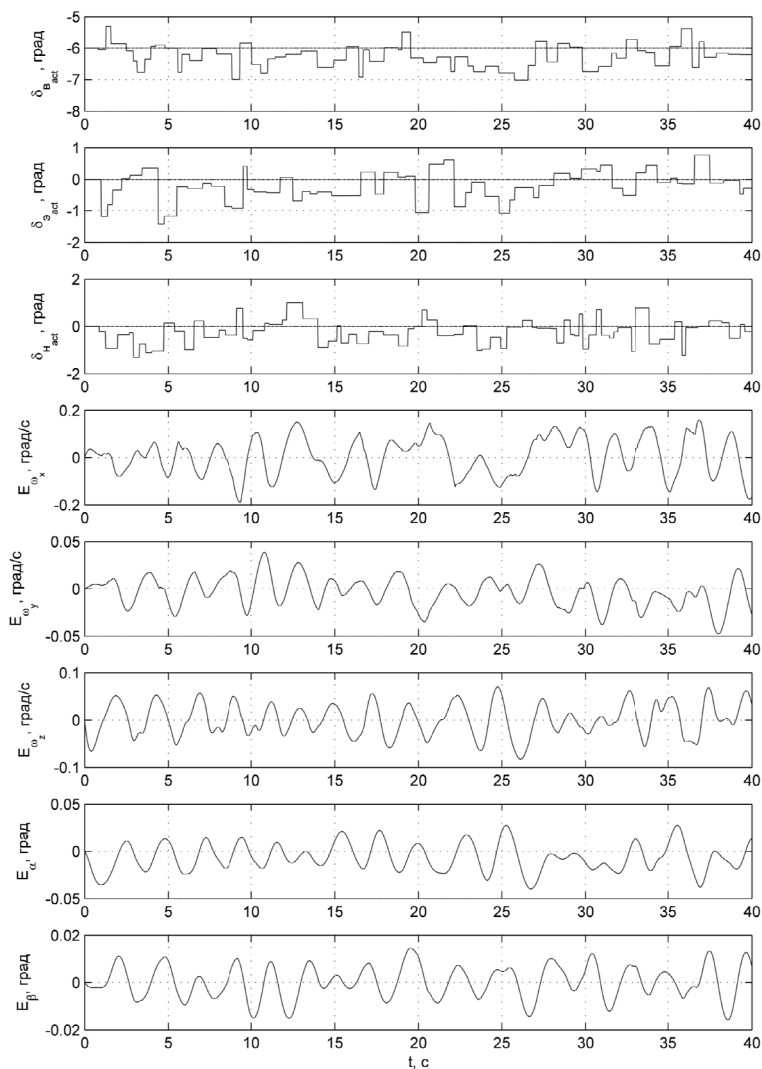


Рис. 3. Оценка обобщающей способности НС-модели после завершающего 1000-шагового этапа обучения: E_α , E_β , E_{ω_x} , E_{ω_y} , E_{ω_z} – погрешность

воспроизведения соответствующих наблюдаемых величин; горизонтальными линиями показаны значения управляющих величин, соответствующие тестовому маневру (для $h = 3000$ м; $V_T = 148$ м/с)

Из рис. 3 видно, что ошибки по всем наблюдаемым переменным состояния незначительны, кроме того, эти ошибки с течением времени практически не растут, что свидетельствует о хороших обобщающих свойствах полученной НС-модели. Следует подчеркнуть, что при тестировании модели реализуется очень активная работа органами управления ЛА для обеспечения возможно большего разнообразия состояний моделируемой системы, а также возможно большего разнообразия перепадов соседних по времени состояний. Дополнительный осложняющий фактор состоит в том, что очередное возмущающее воздействие на ЛА выдается на фоне еще не завершившихся переходных процессов от одного или нескольких предыдущих воздействий.

Рис. 3 характеризует модель, для которой обучающий цикл, описанный выше, уже завершен. О том, как менялись точностные характеристики данной модели в промежуточных точках этого цикла, можно судить по данным, представленным в табл. 2. Также представляет интерес точность решения задачи идентификации аэродинамических характеристик, которую можно оценить сравнением значений, выдаваемых соответствующими НС-модулями с имеющимися экспериментальными данными [4]. Значения среднеквадратической ошибки (СКО) воспроизведения каждой функции соответствующим НС-модулем составляют:

$$\begin{aligned} \text{СКО}_{C_y} &= 9.2759 \cdot 10^{-4}, \quad \text{СКО}_{C_z} = 5.4257 \cdot 10^{-4}, \quad \text{СКО}_{m_x} = 2.1496 \cdot 10^{-5}, \\ \text{СКО}_{m_y} &= 1.3873 \cdot 10^{-5}, \quad \text{СКО}_{m_z} = 1.4952 \cdot 10^{-4}. \end{aligned}$$

При этом уровень ошибки по времени изменяется незначительно, существенных изменений в нем, которые могли бы отрицательно повлиять на адекватность эмпирической НС-модели, не обнаруживается.

Заключение

Полученные результаты показывают, что методы нейросетевого моделирования в сочетании со знаниями и опытом из соответствующей предметной области, а также репрезентативным обучающим набором, являются мощным средством решения сложных задач для управляемых динамических систем различных классов. В качестве средства обучения таких моделей выполнению многошагового прогноза хорошо зарекомендовала себя процедура, основанная на использовании последовательности задач возрастающей сложности.

Список литературы

1. Егорчев М.В., Козлов Д.С., Тюменцев Ю.В., Чернышев А.В. Нейросетевые полуэмпирические модели управляемых динамических систем // Вестник информационных и компьютерных технологий, 2013. № 9. С. 3–10.
2. Егорчев М.В., Тюменцев Ю.В. Обучение полуэмпирической нейросетевой модели управляемого движения самолета // Сб. науч. тр. XVI Всерос. науч.-техн. конф. «Нейроинформатика-2014», ч. 2. М.: НИЯУ МИФИ, 2014. С. 263–272.
3. Аэромеханика самолета: Динамика полета – 2-е изд., перераб. и доп. / А.Ф. Бочкарев и др. М.: Машиностроение, 1985.
4. Nguyen L.T., Ogburn M.E., Gilbert W.P., Kibler K.S., Brown P.W., Deal P.L. Simulator study of stall/post-stall characteristics of a fighter airplane with relaxed longitudinal static stability // *NASA TP-1538*, Dec. 1979.
5. Haykin S. Neural networks: A comprehensive foundation: 2nd Edition, Prentice Hall, 2006.
6. Rivals I., Personnaz L. Black-box modeling with state-space neural networks // Neural Adaptive Control Technology, World Scientific, 1996. P. 237–264.
7. Horn J., De Jesus O., Hagan M.T. Spurious valleys in the error surface of recurrent networks – analysis and avoidance, IEEE Trans. on Neural Networks, 2009, vol. 20, no. 4, pp. 686–700.
8. Pascanu R., Mikolov T., Bengio Y. On the difficulty of training recurrent neural networks, available at: <http://arxiv.org/abs/1211.5063>, 2013.
9. Elman J.L. Learning and development in neural networks // The importance of starting small, Cognition, 1993. V. 48. P. 71–99.
10. Ludik J., Cloete I. Incremental increased complexity training, // Proc. ESANN 1994, 2nd European Sym. on Artif. Neural Netw., Brussels, Belgium, 1994. P. 161–165.
11. Suykens J.A.K., Vandewalle J. Learning a simple recurrent neural state space model to behave like Chua's double scroll // IEEE Trans. on Circuits and Systems I: Fundamental Theory and Applications, 1995. V. 42. No. 8. P. 499–502.
12. Bengio Y., Louradour J., Collobert R., Weston J. Curriculum learning // Proc. of the 26th Annual Intern. Conf. on Machine Learning, ICML, 2009, New York, NY, USA, P. 41–48.

А.О. ЕФИТОРОВ, С.А. БУРИКОВ, Т.А. ДОЛЕНКО

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
sasha.efitorov@yandex.ru

**СРАВНЕНИЕ КАЧЕСТВА РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ
СПЕКТРОСКОПИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ
РАСТВОРОВ НЕЙРОСЕТЕВЫМИ МЕТОДАМИ
И МЕТОДОМ ПРОЕКЦИИ НА ЛАТЕНТНЫЕ СТРУКТУРЫ***

В работе представлены результаты сравнительного анализа применения искусственных нейронных сетей и метода проекций на латентные структуры для одновременного решения задач определения типов и концентраций растворенных неорганических солей в многокомпонентных водных растворах по спектрам комбинационного рассеяния света. Показано, что применение метода проекций на латентные структуры при умеренной нелинейности задачи имеет ряд преимуществ, таких как качество решения и время формирования регрессионной модели.

Ключевые слова: *нейронные сети, проекция на латентные структуры, обратные задачи, спектроскопия, идентификация.*

A.O. EFITOROV, S.A. BURIKOV, T.A. DOLENKO

Lomonosov Moscow State University

**COMPARISON OF SOLVING QUALITY FOR INVERSE
PROBLEM OF MULTI-COMPONENT SOLUTIONS
SPECTROSCOPY BY NEURAL NETWORKS AND BY
METHOD OF PROJECTIONS TO LATENT STRUCTURES**

This study provides comparative analysis of application for neural networks and for the method of projections to latent structures to determine simultaneously types and concentrations of inorganic salts dissolved in multicomponent water solutions using Raman spectra. It is shown that the method of projection to latent structures has several advantages, such as solution quality and generation time for required regression model, for problems with moderate nonlinearity.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 12-01-00958-а.

Keywords: *neural networks, projection to latent structures, inverse problems, spectroscopy, identification.*

Введение

Хорошо известно, что искусственные нейронные сети (НС) представляют собой класс математических алгоритмов, которые демонстрируют высокую эффективность при решении задач аппроксимации, прогнозирования, оценки, классификации и распознавания образов. НС также широко используются при решении обратных задач (ОЗ), где особую роль играют такие их свойства, как обучение на примерах, высокая устойчивость к шумам, устойчивость к противоречивым данным [1, 2]. Помимо НС, данный круг задач способны решать проекционные методы; одним из наиболее эффективных является метод проекций на латентные структуры (ПЛС) [3], успешно применяемый для построения регрессионных моделей и классификаторов [4-7]. В данной работе сравнение методов решения проводилось на примере комплексной ОЗ определения типов и парциальных концентраций неорганических солей в многокомпонентных водных растворах по спектрам комбинационного рассеяния (КР) света.

Задача определения концентраций растворенных в воде веществ очень важна для океанологии, экологического мониторинга и контроля минеральных, технических и сточных вод. Эту задачу требуется решать в бесконтактном экспрессном режиме с приемлемой точностью.

Метод спектроскопии КР удовлетворяет этим требованиям. Принципиальная возможность использования спектров КР для диагностики растворов обусловлена высокой чувствительностью их характеристик к типу и концентрации растворенных в воде солей. В [8, 9] предлагается использовать спектры КР сложных ионов (таких, как полосы анионов NO_3^- , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , CO_3^{2-} в районе 1000 см^{-1}) для определения типов и концентраций солей в воде. Тип аниона может быть определен по положению соответствующей полосы, его концентрация – по её интенсивности. Но этот метод может быть использован только для анализа веществ, имеющих собственные полосы КР, т.е. для солей со сложными ионами. Авторы [10-13] разработали методы определения концентраций растворенных солей по валентной полосе КР воды, в том числе с помощью искусственных нейронных сетей [12, 13].

В данной работе используется метод идентификации и определения индивидуальных концентраций солей, содержащих и сложные, и простые ионы. Метод был впервые предложен авторами в [14] и развит в [15-18]. Присутствие сложных ионов проще всего определяется по наличию их

валентных полос в низкочастотной области спектра КР, а их концентрация может быть определена по зависимости интенсивности этих полос от концентрации, но с учетом влияния на нее других солей. Распознавание и определение концентрации простых ионов осуществляется по изменению формы и положения валентной полосы КР воды в присутствии всех солей, растворенных в воде. Одновременное определение индивидуальных концентраций целого ряда растворенных в воде ионов и их идентификация обеспечиваются применением НС, осуществляющей одновременный анализ обеих областей спектра КР (валентной и низкочастотной). Применение формальных математических моделей обусловлено тем, что из-за сложности объекта не существует адекватной физической модели, которая позволяла бы численно получить зависимость спектра КР воды от концентраций растворенных солей, особенно с учетом их нелинейных взаимодействий. Поэтому в данной работе применяется методический подход к решению обратной задачи "от эксперимента" [19]. В рамках этого подхода данные, используемые для построения формальных моделей, получаются экспериментально, что требует проведения достаточно масштабных измерений. Для реализации этого подхода авторами были получены 8695 экспериментальных спектров для 4268 различных растворов.

В рамках метода 1 единственная НС имеет количество выходов, равное количеству определяемых солей, а амплитуда на этих выходах пропорциональна концентрациям соответствующих солей. В работе [15] описан метод решения ОЗ с помощью НС в два этапа (метод 2). На первом этапе с помощью одной НС определяется компонентный состав раствора, на втором с помощью специализированной НС – концентрации обнаруженных компонентов. Данный подход использовался и в настоящей работе. В [15] показано, что на первом этапе НС безошибочно решает поставленную задачу, однако результаты определения концентраций содержащихся компонентов в целом хуже, чем в рамках метода 1. По-видимому, это связано с крайне негативным соотношением количества примеров и признаков для отдельного класса.

Подготовка данных

Схема и описание экспериментальной установки приведены в [14,15].

Объектами исследований являлись водные растворы солей, содержание которых существенно в природных водах, – NaCl, NH₄Br, Li₂SO₄, KNO₃, CsI. Концентрация каждой соли в растворах изменялась в диапазоне от 0 до 2,5 М с шагом по концентрациям 0,2 – 0,25 М.

Первоначально каждая из двух полос спектра КР записывалась в диапазоне шириной в 1024 спектральных канала, в диапазоне частот $200 \dots 2300 \text{ см}^{-1}$ для низкочастотной (НЧ) полосы и $2300 \dots 4000 \text{ см}^{-1}$ для валентной полосы. Для дальнейшей обработки были выделены более узкие информативные диапазоны: 766 каналов в диапазоне $281 \dots 1831 \text{ см}^{-1}$ для НЧ полосы и 769 каналов в диапазоне $2700 \dots 3900 \text{ см}^{-1}$ для валентной.

Далее для каждой из полос по отдельности производилось вычитание горизонтального пьедестала, обусловленного рассеянием света в кювете с образцом, и производилось нормирование каждой из полос на площадь валентной полосы в указанных информативных диапазонах. Затем проводилась линейная агрегация (суммирование и усреднение) значений интенсивности 8 соседних спектральных каналов по всему диапазону. В работе [18] продемонстрировано, что агрегация является наиболее эффективным методом понижения размерности входных данных, позволяющим улучшить качество решения ОЗ.

Полученный массив данных (192 признака, 9144 примера) был разделен на 31 «комбинаторный» класс, в зависимости от присутствующих в растворе компонент. Этот набор использовался для решения задачи определения концентраций растворенных солей нейронными сетями в рамках метода 2 и ПЛС метода. В свою очередь, не разделенный на классы массив примеров использовался для определения присутствующих в растворе компонент в рамках первого этапа нейросетевого метода 2, а также для определения как типов присутствующих компонент, так и их концентраций в рамках нейросетевого метода 1.

Далее проводилось разделение данных случайным образом внутри каждого комбинаторного класса на тренировочный, тестовый и экзаменационный наборы в соотношении 70:20:10. Наборы каждого типа для всех классов также объединялись для получения набора такого типа для полного массива данных. Тренировочный набор использовался для построения регрессионных моделей. Тестовый набор использовался для предотвращения переобучения сетей – когда ошибка на тестовом наборе начинает увеличиваться, обучение НС следует остановить. Формирование ПЛС-модели останавливалось при достижении сходимости на тренировочном наборе. Для независимой оценки все представленные ниже результаты приведены для экзаменационного набора.

Постановка задачи

Опираясь на представленные результаты и предположения [15], проводилось решение ОЗ на агрегированных данных двумя нейросетевыми

методами, описанными выше (в один и в два этапа). Предположение об эффективности работы этапа 2 базировалось на увеличении на порядок соотношения количества примеров к количеству признаков после проведения агрегации. Также определение концентраций компонент для соответствующего комбинаторного класса проводилось методом ПЛС.

Во всех описанных ниже вычислительных экспериментах для нейросетевого решения задачи использовался персептрон с тремя скрытыми слоями, содержащими 40, 20 и 10 нейронов. Стоит отметить, что были проведены дополнительные вычислительные эксперименты по решению ОЗ персептроном с другим количеством скрытых слоев и нейронов, однако архитектура 40-20-10 продемонстрировала лучшие результаты. В выходном слое использовалась линейная передаточная функция, в скрытых слоях – логистическая. Использовались следующие параметры: скорость обучения – 0.01; момент – 0.5; критерий останова – 1000 эпох после минимума ошибки на тестовом наборе данных. Чтобы исключить влияние выбора начального приближения весов НС на результат, в каждом случае производилась тренировка 5 нейронных сетей с различными начальными приближениями весов, а результаты их решения ОЗ усреднялись. ПЛС-модель строилась на алгоритме NIPALS для 25 компонент. Критерий останова – сходимость алгоритма на тренировочном наборе. При решении ОЗ выбиралось наименьшее, в зависимости от количества компонент, значение среднего абсолютного отклонения (CAO) для данной соли в данном комбинаторном классе.

Вычислительные эксперименты и их результаты

В табл. 1 приведены значения CAO определения концентраций каждой соли для каждого комбинаторного класса, полученные с помощью нейросетевого решения ОЗ методом 1; в табл. 2 – с помощью нейросетевого решения ОЗ методом 2; в табл. 3 – методом ПЛС. Заливкой обозначены ячейки, содержащие наименьшее значение CAO по результатам применения всех методов; диагональной штриховкой – лучший результат решения, полученный более чем одним методом.

В целом, самый худший результат решения ОЗ продемонстрировал подход обучения НС для каждого комбинаторного класса. Значение средней суммарной CAO равно 0,0468, лучшие в сравнении с другими методами результаты определения концентраций солей наблюдались лишь в 18 из 80 случаев, абсолютно лучшие – в 12 случаях (см. табл. 2).

Таблица 1

**Среднее абсолютное отклонение (САО) на экзаменационном наборе
в различных комбинаторных классах при определении концентрации солей
нейросетевым методом 1**

Класс	Солей	NaCl	NH ₄ Br	Li ₂ SO ₄	KNO ₃	CsI
1	1	0.054				
2	1		0.024			
3	1			0.007		
4	1				0.013	
5	1					0.053
6	2	0.03	0.024			
7	2	0.035		0.022		
8	2	0.022			0.033	
9	2	0.084				0.076
10	2		0.042	0.017		
11	2		0.023		0.014	
12	2		0.029			0.9949
13	2			0.045	0.037	
14	2			0.016		0.022
15	2				0.015	0.017
16	3	0.033	0.022	0.021		
17	3	0.015	0.053		0.039	
18	3	0.035	0.023			0.027
19	3	0.018		0.029	0.045	
20	3	0.018		0.029		0.017
21	3	0.017			0.019	0.018
22	3		0.025	0.018	0.033	
23	3		0.031	0.020		0.028
24	3		0.022		0.015	0.018
25	3			0.026	0.031	0.027
26	4	0.025	0.019	0.023	0.021	
27	4	0.023	0.018	0.022		0.036
28	4	0.020	0.021		0.018	0.024
29	4	0.027		0.015	0.012	0.023
30	4		0.020	0.026	0.014	0.020
31	5	0.024	0.019	0.022	0.016	0.021

Примечание. Отмечены наилучшие результаты среди трёх методов (см. в тексте).

Таблица 2

**Среднее абсолютное отклонение (САО) на экзаменационном наборе
в различных комбинаторных классах при определении концентрации солей
нейросетевым методом 2**

Класс	Солей	NaCl	NH ₄ Br	Li ₂ SO ₄	KNO ₃	CsI
1	1	0.0038				
2	1		0.0004			
3	1			0.0002		
4	1				0.0018	
5	1					0.0008
6	2	0.039	0.021			
7	2	0.022		0.023		
8	2	0.300			0.046	
9	2	0.108				0.078
10	2		0.055	0.022		
11	2		0.029		0.019	
12	2		0.023			0.027
13	2			0.037	0.042	
14	2			0.240		0.017
15	2				0.025	0.019
16	3	0.037	0.024	0.026		
17	3	0.025	0.118		0.080	
18	3	0.036	0.015			0.040
19	3	0.037		0.023	0.032	
20	3	0.031		0.021		0.023
21	3	0.032			0.027	0.015
22	3		0.016	0.020	0.025	
23	3		0.367	0.305		0.430
24	3		0.027		0.060	0.017
25	3			0.018	0.029	0.024
26	4	0.031	0.022	0.021	0.017	
27	4	0.026	0.018	0.024		0.038
28	4	0.025	0.021		0.020	0.039
29	4	0.030		0.019	0.020	0.025
30	4		0.018	0.021	0.016	0.017
31	5	0.026	0.019	0.019	0.016	0.021

Примечание. Отмечены наилучшие результаты среди трёх методов (см. в тексте).

Таблица 3

**Среднее абсолютное отклонение (САО) на экзаменационном наборе
в различных комбинаторных классах при определении концентрации солей
методом ПЛС**

Класс	Солей	NaCl	NH ₄ Br	Li ₂ SO ₄	KNO ₃	CsI
1	1	0.000016				
2	1		0.000015			
3	1			0.000009		
4	1				0.000017	
5	1					0.000016
6	2	0.024	0.024			
7	2	0.030		0.026		
8	2	0.016			0.042	
9	2	0.089				0.083
10	2		0.038	0.018		
11	2		0.020		0.016	
12	2					0.029
13	2			0.054	0.041	
14	2			0.022		0.010
15	2				0.030	0.013
16	3	0.045	0.017	0.043		
17	3	0.017	0.045		0.030	
18	3	0.029	0.013			0.023
19	3	0.017		0.022	0.022	
20	3	0.025		0.028		0.017
21	3	0.021			0.017	0.023
22	3		0.014	0.014	0.022	
23	3		0.024	0.022		0.026
24	3		0.024		0.025	0.014
25	3			0.017	0.033	0.021
26	4	0.031	0.017	0.027	0.023	
27	4	0.031	0.016	0.023		0.032
28	4	0.018	0.015		0.019	0.026
29	4	0.037		0.020	0.013	0.025
30	4		0.018	0.021	0.019	0.017
31	5	0.040	0.027	0.037	0.025	0.028

Примечание. Отмечены наилучшие результаты среди трёх методов (см. в тексте).

Более убедительными выглядят результаты решения ОЗ универсальной нейронной сетью, обученной определять одновременно состав и концентрации компонент на всем наборе примеров. Значение САО по всем классам и солям (полная САО) составляет 0,0381; лучшие результаты для 31 из 80 случаев, абсолютно лучшие – в 25 случаях (см. табл. 1).

Метод построения проекционной модели ПЛС для каждого комбинаторного класса оказался наиболее эффективным. Полная САО равна 0,0243; лучшие результаты продемонстрированы в 41 из 80 случаев, абсолютно лучшие – в 35 случаях (см. табл. 3).

Стоит отметить, что при наличии в растворе 5 компонент решение ОЗ методом ПЛС хуже в сравнении с результатами применения нейросетевых методов, которые в данном случае демонстрируют сходные результаты. Это может объясняться тем, что метод ПЛС – линейный, ввиду чего плохо описывает сильные нелинейные взаимодействия между компонентами раствора. По той же причине качество решения ОЗ в случае однокомпонентного раствора методом ПЛС на порядок выше качества решения той же задачи нейронной сетью.

Заключение

Был проведен сравнительный анализ различных методов решения комплексной обратной задачи определения типов и индивидуальных концентраций солей в 5-компонентных водных растворах по спектрам КР в рамках подхода “от эксперимента” с использованием двух полос спектра КР водных растворов – низкочастотной ($280\text{--}1830\text{ см}^{-1}$) и валентной полосы воды ($2700\text{--}3900\text{ см}^{-1}$).

Показано, что наилучших результатов в случаях, когда нелинейность задачи не слишком велика, удастся добиться проекционным методом ПЛС. Дальнейшие эксперименты будут связаны с попыткой уменьшения проявления нелинейностей методами предобработки данных с целью улучшения качества решения ОЗ проекционным методом ПЛС.

Авторы выражают благодарность С.А.Доленко за ценные обсуждения.

Список литературы

1. Terekhov S.A. Direct, Inverse and Combined Problems in Complex Engineered System Modeling by Artificial Neural Networks // Proc. SPIE AeroSense Conference, Orlando, Florida, 21-24 April 1997. (Proc. SPIE, Vol. 3077, Paper 71.)
2. Доленко С.А., Доленко Т.А., Персианцев И.Г., Фадеев В.В., Буриков С.А. Решение обратных задач оптической спектроскопии с помощью нейронных сетей. //Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 2005. № 1-2. С. 89-97.

3. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных. Избранные главы / Пер. с англ. С.В. Кучерявского / Под ред. Родионовой О.Е. Черноголовка: ГЕОХИ, 2005.
4. Масякова Е.Н., Власова И.В., Корягина А.Ю. Спектрофотометрическое определение витаминов в неразделенных смесях с применением метода проекции на латентные структуры (PLS). // Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2010. № 2.
5. Беляев И.А., Кучерявский С.В. Применение принципов формального моделирования для классификации медицинских изображений. // Математика. Компьютер. Образование. XIV международная конференция. Сборник научных трудов. 2007. Т.2. С. 355-361.
6. Дмитриев А.А., Кучерявский С.В. Применение методов многомерного анализа данных для диагностики ранних стадий болезни Альцгеймера по томограммам мозга. //Известия Алтайского государственного университета, 2010. Т.2. № 1.
7. Сулейманов А.М., Померанцев А.Л., Родионова О.Е. Прогнозирование долговечности материалов проекционными математическими методами. // Известия КГАСУ, 2009. №2. С. 274-278.
8. Baldwin S.F., Brown C.W. Detection of Ionic Water Pollutants by Laser Excited Raman Spectroscopy // Water Research, 1972. V. 6. P. 1601-1604.
9. Rudolph W.W., Irmer G. Raman and Infrared Spectroscopic Investigation on Aqueous Alkali Metal Phosphate Solutions and Density Functional Theory Calculations of Phosphate-Water Clusters // Applied Spectroscopy, 2007. V. 61. No. 12. P. 274A-292A.
10. Furic K., Ciglenecki I., Cosovic B. Raman Spectroscopic Study of Sodium Chloride Water Solutions // J. Molecular Structure, 2000. V. 6. P. 225-234.
11. Dolenko T.A., Churina I.V., Fadeev V.V., Glushkov S.M. Valence Band of Liquid Water Raman Scattering: Some Peculiarities and Applications in the Diagnostics of Water Media // J. Raman Spectroscopy, 2000. V. 31. p. 863-870.
12. Burikov S.A., Dolenko T.A., Fadeev V.V., Sugonyaev A.V. New Opportunities in the Determination of Inorganic Compounds in Water by the Method of Laser Raman Spectroscopy // Laser Physics, 2005. V. 15. No. 8. P. 1-5.
13. Burikov S.A., Dolenko T.A., Fadeev, V.V. Identification of Inorganic Salts and Determination of Their Concentrations in Water Solutions from the Raman Valence Band Using Artificial Neural Networks // Pattern Recognition and Image Analysis, 2007. V. 17. No. 4. P. 554-559.
14. Буриков С.А., Доленко С.А., Доленко Т.А., Персианцев И.Г. Нейросетевое решение обратной задачи идентификации и определения парциальных концентраций неорганических солей в многокомпонентном водном растворе. // Нейроинформатика-2010. XII Всероссийская научно-техническая конференция. Сборник научных трудов. Ч.2. М.: МИФИ, 2010. С. 100-110.
15. Буриков С.А., Доленко С.А., Доленко Т.А., Персианцев И.Г. Применение адаптивных нейросетевых алгоритмов для решения задач идентификации и определения концентраций солей в многокомпонентном водном растворе по спектрам комбинационного рассеяния света. //Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 2010. № 3. С. 55-69.

16. Burikov S.A., Dolenko S.A., Dolenko T.A., Persiantsev I.G. Application of Artificial Neural Networks to Solve Problems of Identification and Determination of Concentration of Salts in Multi-Component Water Solutions by Raman spectra. // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics), 2010. V. 19. No. 2. P.140-148.

17. Dolenko S.A., Burikov S.A., Dolenko T.A., Persiantsev I.G. Adaptive Methods for Solving Inverse Problems in Laser Raman Spectroscopy of Multi-Component Solutions. // Pattern Recognition and Image Analysis, 2012. V. 22. No. 4. P. 551-558.

18. Dolenko S., Burikov S., Dolenko T., Efitorov A., Persiantsev I. Methods of input data compression in neural network solution of inverse problems of spectroscopy of multi-component solutions. 11th International Conference on Pattern Recognition and Image Analysis // New Information Technologies (PRIA-11-2003). Сборник научных трудов. IPSI RAS Samara. Т. 2. С. 541-544.

19. Гердова И.В., Доленко С.А., Доленко Т.А., Персианцев И.Г., Фадеев В.В., Чурина И.В. Новые возможности в решении обратных задач лазерной спектроскопии с применением искусственных нейронных сетей. // Известия РАН. Серия физическая, 2002. Т. 66. № 8. С. 1116-1124.

К.А. ГУЩИН, С.А. БУРИКОВ, Т.А. ДОЛЕНКО

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
kirgush@gmail.com, burikov@lid.phys.msu.ru, tdolenko@lid.phys.msu.ru

ПОНИЖЕНИЕ РАЗМЕРНОСТИ ДАННЫХ И ОЦЕНКА КАЧЕСТВА КЛАСТЕРИЗАЦИИ В ЗАДАЧАХ АНАЛИЗА СОСТАВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ*

В работе представлены результаты поиска оптимальной комбинации метода понижения размерности данных и алгоритма кластеризации для анализа массива спектров комбинационного рассеяния света многокомпонентных растворов неорганических солей. Представлен наиболее информативный критерий оценки качества получаемой кластеризации. Показано, что применение специализированных алгоритмов совместно с методами понижения размерности повышает качество и устойчивость решения задачи кластеризации.

Ключевые слова: *нейронные сети Кохонена, кластеризация, спектроскопия, определение компонентного состава.*

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 13-01-00897-а.

K.A. GUSHCHIN, S.A. BURIKOV, T.A. DOLENKO

Lomonosov Moscow State University

DATA DIMENSIONALITY REDUCTION AND CLUSTERING QUALITY ESTIMATION IN COMPOSITION ANALYSIS PROBLEMS FOR MULTI-COMPONENT SOLUTIONS

The paper presents the results of searching for optimal combination of data dimensionality reduction method with clustering algorithm to analyze Raman spectra of multi-component solutions of inorganic salts. The most informative clustering quality measure is presented. It is demonstrated that use of specialized algorithms together with dimensionality reduction techniques leads to improvement in quality and stability of solution results for the clustering problem.

Keywords: *Kohonen neural networks, clusterization, spectroscopy, identification, determination of component composition, methods of dimensionality reduction, estimation of clustering quality.*

Введение

В настоящее время весьма актуальными являются задачи контроля водных технологических сред; экологического мониторинга и диагностики природных вод, контроля состава минеральных вод; определения солевого состава морских, речных и пластовых вод [1]. Очевидно, что для решения этих задач необходимы дистанционные и экспрессные методы определения солевого/ионного состава вод, работающие в режиме реального времени. Таким требованиям удовлетворяют методы колебательной спектроскопии (комбинационного рассеяния (КР) света и инфракрасного (ИК) поглощения) [2]. Однако помимо собственно измерений, для решения подобных задач необходима разработка методов обработки и анализа полученных экспериментальных данных.

В данной работе разрабатывается новый метод определения солевого состава природных сред по спектрам КР, основанный на современных методиках кластеризации данных.

Ранее авторами были проведены вычислительные эксперименты по определению солевого состава водного раствора с помощью алгоритмов классификации, одновременно с определением концентраций веществ, входящих в состав раствора [3]. Результаты показали, что задача классификации решается с точностью, близкой к 100%, однако получаемое решение неустойчиво по отношению к новым данным.

Альтернативным вариантом является решение задачи идентификации солевого состава посредством алгоритмов кластеризации. Ожидается, что данный метод окажется более устойчивым к наличию в растворе других солей и другим отклонениям условий работы от условий исходного эксперимента.

Экспериментальная часть

Для разработки нового метода определения ионного состава многокомпонентных растворов с помощью самоорганизующихся карт Кохонена была получена база экспериментальных данных – 807 спектров комбинационного рассеяния (КР) водных растворов солей KI, NH₄F, NaNO₃, MgSO₄, AlCl₃ в широком диапазоне их концентраций [4]: KI – до 4М, NH₄F – до 4 М, NaNO₃ – до 4 М, MgSO₄ – до 2.5 М, AlCl₃ – до 3 М. Так как при таких концентрациях соли находятся в растворах в полностью диссоциированном состоянии, а все 10 образующих их ионов различны, можно с некоторой долей упрощения говорить о солевом составе растворов вместо ионного и о концентрации солей вместо концентрации ионов. Растворы отличались друг от друга солевым составом (одновременно содержали ионы от одной до пяти солей) и концентрацией (от 0 до 3-4 М с шагом по концентрации 0.05-0.1 М). Концентрации ионов в растворах выбирались ниже пределов растворимости, однако достаточно большими (до 3-4 М), чтобы, по возможности, увеличить расстояние между спектрами в пространстве интенсивностей в спектральных каналах.

Спектры КР растворов регистрировались на лазерном КР-спектрометре [4]. На рис. 1 и 2 представлены типичные спектры КР исследованных растворов. Как видно из рисунков, основными идентификационными признаками при решении задачи определения типов и концентрации ионов (солей) в растворах по спектрам КР являются положение и интенсивность собственных линий сложных ионов, а также положение и форма валентной полосы КР воды.

Алгоритмы и показатели качества кластеризации

Для вычислительных экспериментов использовались следующие алгоритмы: классическая самоорганизующаяся карта Кохонена [5] и самоорганизующаяся карта Кохонена, использующая взвешенную кросс-корреляцию как метрику расстояния между примерами (сокращенно – wccsom). Последний из представленных алгоритмов считается специализированным для работы со спектрами [6]. Для проведения расчетов авто-

ры использовали библиотеки `kohonen` и `wccsom` для языка программирования R [7, 8].

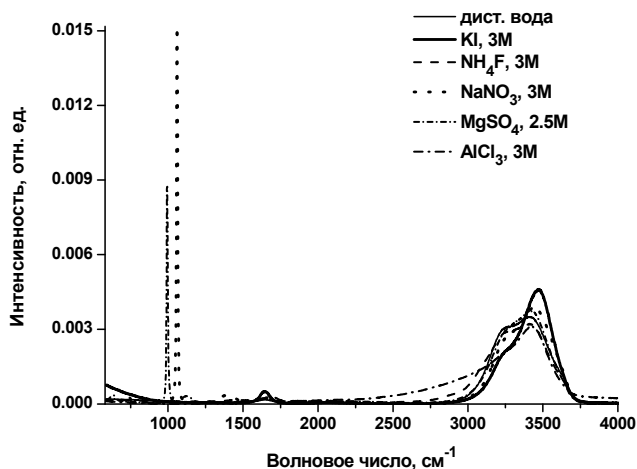


Рис. 1. Спектры КР дистиллированной воды и однокомпонентных растворов солей KI, NH_4F , NaNO_3 , MgSO_4 , AlCl_3

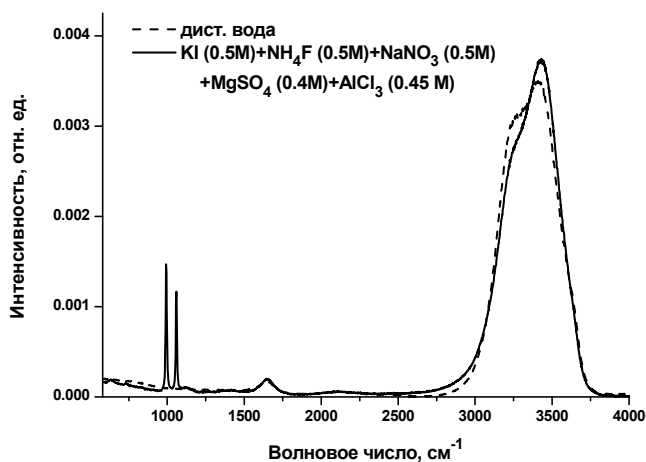


Рис. 2. Спектры КР дистиллированной воды и пятикомпонентного раствора

Для оценки качества полученных вариантов кластеризации использовались как классические показатели качества, так и введенные авторами на основе априорных знаний о составах растворов. В ходе вычислительных экспериментов было установлено, что наиболее подходящим для использования в данной задаче является классический индекс Данна (Dunn index) [8]. Остальные рассмотренные в работе часто используемые показатели качества кластеризации, такие как гамма-коэффициент Пирсона и Silhouette индекс, в данной задаче оказались малоинформативными.

Индекс Данна

Индекс Данна (Dunn index) по определению представляет собой отношение минимального межкластерного расстояния к максимальному внутрикластерному расстоянию.

$$D = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \min_{1 \leq j \leq n, i \neq j} \left\{ \frac{d(i, j)}{\max_{1 \leq k \leq n} d'(k)} \right\} \right\},$$

где $d(i, j)$ – расстояние между кластерами i и j , $d'(k)$ – внутрикластерное расстояние для кластера k . Индекс Данна увеличивается по мере того, как более компактными и удаленными друг от друга становятся кластеры. В отсутствие априорных знаний принято считать наилучшей кластеризацию с максимальным значением индекса.

На данных полной размерности максимальное значение индекса Данна (рис. 3) соответствует кластеризации посредством карты Кохонена с взвешенной кросс-корреляцией для 40 кластеров, при том, что при вычислении самого индекса Данна используется евклидова метрика расстояния. Однако это значение трудно объяснить с физической точки зрения.

Понижение размерности пространства входных данных

В ходе первичных экспериментов по кластеризации данных было установлено, что качество решения можно повысить, применяя различные методы понижения размерности пространства входных данных. В настоящей работе авторами были применены следующие методы понижения размерности: равномерное агрегирование каналов и отсечка каналов, дисперсия в которых не превышала некоторой пороговой величины, как содержащих малое количество информации о спектре и, следовательно, о составе раствора.

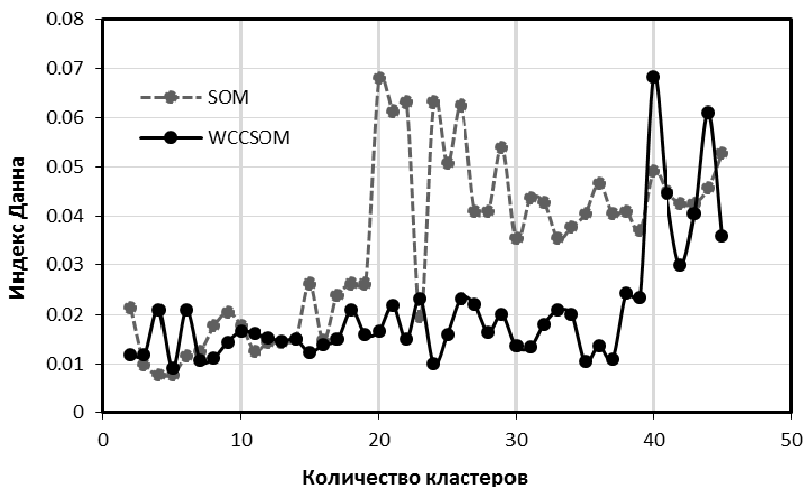


Рис. 3. Динамика индекса Данна в зависимости от количества кластеров при полной размерности пространства входных данных

В ходе вычислительных экспериментов было рассчитано более 1100 различных вариантов кластеризации данных пониженной размерности. В результате было установлено, что максимизирующими индекс Данна являются следующие методы понижения размерности: равномерная агрегация по 5 каналам и отсечка на уровне 25% от средней дисперсии по каналам. Стоит отметить, что максимальное значение индекса Данна повышается относительно кластеризации на данных полной размерности (рис. 4).

Для карты Кохонена со взвешенной кросс-корреляцией, максимизирующей индекс Данна оказалась агрегация по 3 каналам. При том, что итоговое значение оказалось ниже, чем у обычной карты, четко выраженный локальный максимум достигается при 32 кластерах (рис. 5), что соответствует количеству классов спектров в рассматриваемой задаче.

Соотнесение результатов работы алгоритмов с реальным составом растворов

Для сравнения полученных вариантов кластеризации с реальным составом растворов были введены индексы, основанные на априорной информации о присутствии или отсутствии той или иной соли в растворе.

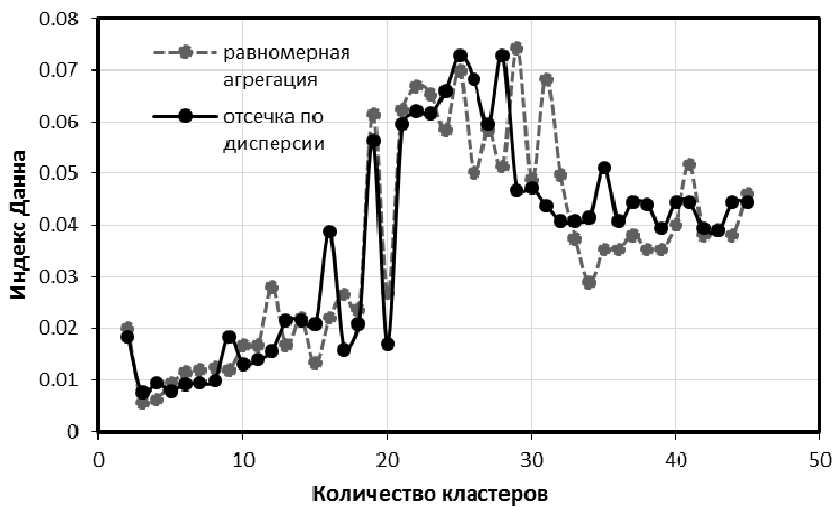


Рис. 4. Динамика индекса Данна в пространствах пониженной размерности

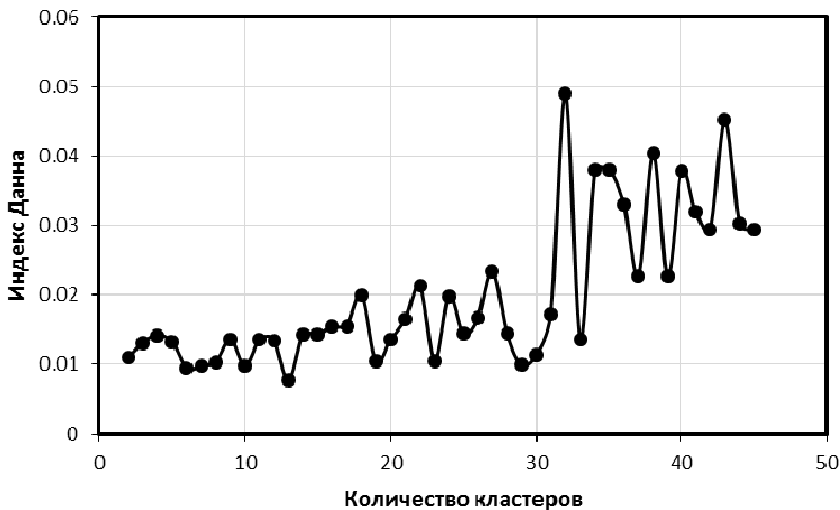


Рис. 5. Динамика индекса Данна в пространстве пониженной размерности для взвешенной кросс-корреляции как метрики расстояния

В связи с тем, что в данной работе исследовались растворы, содержащие от 0 до 5 солей, всего можно было выделить $2^5=32$ класса данных по отношению к тому, какая комбинация солей присутствовала в растворах, относящихся к данному классу. Эти 32 класса разбивались на следующие группы: 1 класс со спектрами дистиллированной воды, 5 классов со спектрами растворов единственной соли, по 10 классов с растворами 2 или 3 солей, 5 классов с растворами 4 солей, 1 класс с растворами всех 5 солей.

Сравнение осуществлялось посредством введения показателей контрастности и степени разделения классов.

Пусть $N_{\max}^i$ – максимальное количество примеров из класса i , попавших при данном разбиении в один кластер. Назовём *контрастностью разбиения* сумму по всем классам $\sum_i N_{\max}^i / N$, нормированную на общее количество примеров N и выраженную в процентах. В идеальном случае (если все примеры каждого класса попадают в один и тот же кластер) этот показатель равен 100%.

Назовём *степенью разделения* выраженное в процентах отношение количества классов, попавших наибольшим количеством своих примеров в разные кластеры, к общему количеству классов (32). Ясно, что с увеличением количества кластеров C степень разделения растёт, стремясь к 100%, однако этот рост нелинеен ввиду наличия неиспользуемых кластеров или кластеров, в которые попала небольшая доля примеров класса.

Анализ динамики показателей контрастности и степени разделения показал, что значительного преимущества в отношении в части соотношения результатов кластеризации с реальными классами солевых растворов не имеет ни один вариант кластеризации. Отдельный интерес в этом отношении представляет кластеризация картой со взвешенной кросс-корреляцией на данных с агрегацией по 3 каналам, как имеющая максимум индекса Данна на 32 классах (рис. 5).

При 32 кластерах наблюдаются слабо выраженные локальные максимумы показателей степени разделения (см. рис. 6) и контрастности (рис. 7), что говорит о том, что результат кластеризации имеет под собой реальную основу. Однако стоит отметить, что максимумы показателей степени разделения и контрастности наблюдаются также и при других значениях количества кластеров, а также при агрегации большего числа каналов при количестве кластеров, не доставляющих максимум индексу Данна. Это свидетельствует о том, что на данный момент не найдено алгоритма, имеющего четко выраженное преимущество в разделении данных в соответствии с исходными классами солей. Однако некоторые разбиения представляют из себя более четкие, отдельные друг от друга кластеры, что, в конечном счете, означает более устойчивое решение,

которое можно тестировать на новых наборах данных. При этом ошибка распознавания для такого решения не будет значительно отклоняться от среднего по другим протестированным комбинациям метода понижения размерности и реализации карты Кохонена.

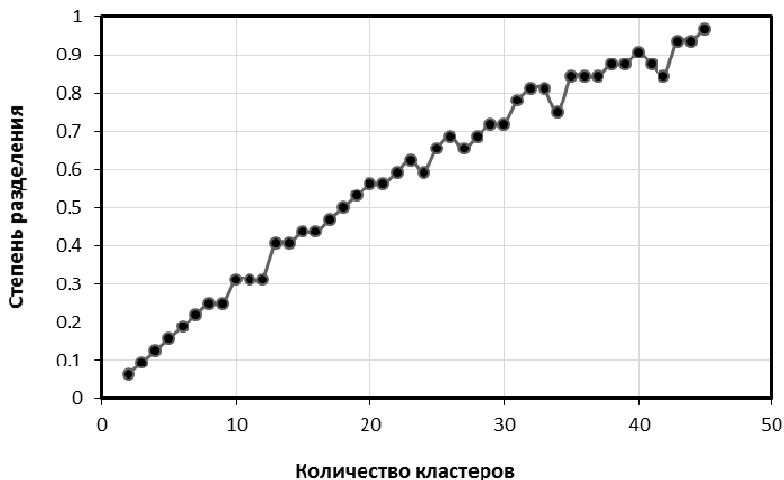


Рис. 6. Динамика степени разделения для карты WccSom с агрегацией по трем каналам

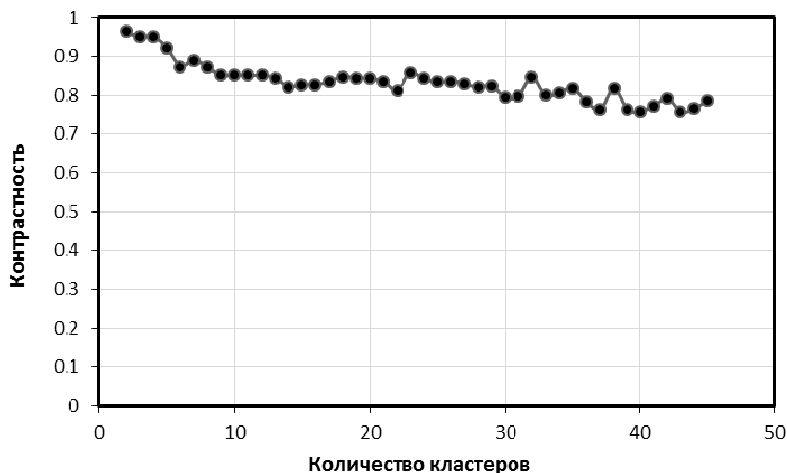


Рис. 7. Динамика контрастности для карты WccSom с агрегацией по трем каналам

Выводы

По результатам анализа многочисленных вариантов кластеризации рекомендуемым методом понижения размерности представляется равномерная агрегация каналов. Исходя из динамики индекса Данна, степени разделения и контрастности можно заключить, что алгоритмы способны выделять в наборе данных компактные структуры, имеющие под собой физический смысл, но сложная и запутанная структура исходного входного пространства не позволяет полноценно разделять данные на отдельные классы путём кластеризации.

В дальнейшем представляется целесообразным продолжить тестирование различных вариантов преобразования пространства входных данных – например, использовать анализ главных компонент. Также представляется перспективным протестировать применение глубоких нейронных сетей.

Авторы выражают благодарность С.А. Доленко за постановку задачи и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Crompton T.R. Determination of anions in natural and treated waters. Taylor&Francis, 2002.
2. Burikov S.A., Dolenko T.A., Patsaeva S.V., Yuzhakov V.I. Laser-based analyzer of liquids for technological and ecological applications. //Water: Chemistry and Ecology, 2012. No. 1. P. 63-73.
3. Буриков С.А., Доленко С.А., Доленко Т.А., Персианцев И.Г. Применение адаптивных нейросетевых алгоритмов для решения задач идентификации и определения концентраций солей в многокомпонентном водном растворе по спектрам комбинационного рассеяния света. // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 2010. № 3. С. 55-69.
4. Доленко С.А., Буриков С.А., Гущин К.А., Доленко Т.А.. Применение нейронных сетей Кохонена для анализа состава многокомпонентных растворов. // XVI Всероссийская научно-техническая конференция "Нейроинформатика-2014" с международным участием: Сборник научных трудов. Ч. 2. М.: НИЯУ МИФИ, 2014. С. 281-290.
5. Kohonen, T. Self-Organizing Maps. // 3d Edition. Berlin etc., Springer, 2001.
6. De Gelder R., Wehrens R., and Hageman J.A. A Generalized Expression for the Similarity of Spectra: Application to Powder Diffraction Pattern Classification. // J. of Computational Chemistry, 2001. V. 22. No. 3. P. 273-289.
7. Wehrens R., Buydens L.M.C. Self- and Super-organising Maps in R: the Kohonen Package. // J. Stat. Softw., 2007. V. 21. No. 5.
8. Wehrens R. Wccsom: SOM networks for comparing patterns with peak shifts. R package version 1.2.8. 2012. <http://CRAN.R-project.org/package=wccsom>

9. Dunn, J.C. A Fuzzy Relative of the ISODATA Process and Its Use in Detecting Compact Well-Separated Clusters. // J. of Cybernetics, 1973. V. 3. No. 3. P. 32–57.

В.Р. ШИРОКИЙ

НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва
shiroky@srd.sinp.msu.ru

СРАВНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ГЕОМАГНИТНОГО DST ИНДЕКСА НА РАЗЛИЧНЫХ НАБОРАХ ДАННЫХ И СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА РАБОТЫ МОДЕЛЕЙ*

Сложность нейросетевого прогнозирования состояния магнитосферы Земли обусловлена в числе прочего малой долей примеров, полученных во время геомагнитных возмущений, в общем числе примеров. Следствием этого являются высокие интегральные показатели прогнозирующих моделей, как нейросетевых, так и тривиальных. Работа посвящена сравнению моделей, обученных на различных наборах данных, и показателей оценки их качества.

Ключевые слова: *временной ряд, прогнозирование, магнитосфера, индекс Dst, нейронные сети, геомагнитные возмущения.*

V.R. SHIROKY

Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics Lomonosov Moscow State University

COMPARISON OF NEURAL NETWORK MODELS FOR PREDICTION OF GEOMAGNETIC DST INDEX ON DIFFERENT DATASETS AND COMPARISON OF METHODS FOR MODEL QUALITY EVALUATION

Complexity of neural network prediction for a state of the Earth's magnetosphere is determined inter alia by the small fraction of available samples in the total number of samples obtained during geomagnetic disturbances. The consequence of this fact is high integral statistics of predicting models, both trivial

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 14-01-00293-а.

and neural network based. This study is devoted to a comparison of models trained on different data sets, and to the comparison of their quality estimation indexes.

Keywords: *time series, prediction, magnetosphere, Dst index, neural networks, geomagnetic disturbances.*

Введение

Взаимодействие солнечного ветра (СВ) с магнитосферой Земли представляет собой сложный процесс, результатом которого являются геомагнитные возмущения (ГВ). ГВ оказывают непосредственное влияние на состояние околоземного космического пространства (ОКП), поскольку после ГВ, как правило, на порядок и более возрастает поток релятивистских электронов внешнего радиационного пояса Земли (например, [1]). Это может приводить к сбоям в электронике, находящейся на борту космических аппаратов (например, [2]). Известно также, что магнитные бури (сильные ГВ) могут вызывать нарушения в работе телеграфных линий, трубопроводов, линий электропередач и энергосетей, приводить к нарушениям радиосвязи, во многих работах исследуются вопросы влияния магнитных бурь на самочувствие людей. Таким образом, задача прогнозирования ГВ является актуальной и активно изучается.

Для оценки геомагнитной обстановки используются различные геомагнитные индексы, которые могут отражать как состояние магнитосферы Земли в целом, так и определенные процессы в определенных широтах. Для нашего исследования был выбран Dst-индекс, который вычисляется на основании показаний геомагнитных обсерваторий, находящихся на поверхности Земли вблизи экватора. Индекс вычисляется Всемирным центром данных в Киото, Япония (Kyoto WDC) [3], который предоставляет среднечасовые значения индекса. Их можно получить на странице предоставления данных по геомагнетизму (Geomagnetic Data Service) [4].

Источниками возмущений магнитосферы Земли являются корональные выбросы массы (КВМ), достигающие орбиты Земли, и высокоскоростные потоки СВ. Необходимым, а возможно и достаточным, условием возникновения ГВ является присутствие южной (отрицательной) компоненты межпланетного магнитного поля (ММП) B_z , при наличии которой возможна передача энергии от солнечного ветра в магнитосферу.

В геомагнитном возмущении можно выделить несколько фаз. В каждом ГВ обязательно есть главная фаза (Main Phase – MP) и фаза восстановления (Recovery Phase – RP). Главная фаза обусловлена взаимодействием СВ с магнитосферой Земли. Как правило, она длится несколько ча-

сов и характеризуется быстрым падением значения индекса. Фаза восстановления соответствует возвращению магнитосферы в исходное невозмущенное состояние, характеризуется постепенным увеличением Dst индекса до фоновых значений и может длиться несколько суток. Также в некоторых ГВ можно выделить фазу внезапного начала (Sudden Commencement, SC), характеризующуюся положительными значениями Dst-индекса, предшествующими главной фазе ГВ.

В лаборатории автора ранее проводились исследования, посвященные нейросетевому прогнозированию различных параметров магнитосферы Земли, и было показано, что лучшее качество прогноза Dst-индекса достигается при построении нейросетевой модели, использующей в качестве входных данных как историю Dst индекса, так и параметры СВ и ММП [5]. Прогнозирование Dst индекса осуществлялось на один час вперед, каждый пример содержал среднечасовые значения основных параметров СВ и ММП и самого индекса Dst, с погружением на 24 часа.

Однако, ввиду малой доли числа примеров, полученных во время ГВ, в общем числе примеров, интегральные показатели качества модели, такие как, например, коэффициент множественной детерминации, показывали очень высокие значения, которые не отражали качество работы модели. Для оценки модели использовалось сравнение с показателями тривиальной модели, для которой прогнозируемое значение равнялось текущему.

Ввиду того, что наибольший интерес представляет прогнозирование значения геомагнитного индекса во время ГВ, было принято решение оценивать качество работы модели не на всем наборе данных, а только на примерах, полученных во время ГВ. С этой целью был разработан специальный алгоритм, в автоматическом режиме выделяющий из полного набора данных примеры, соответствующие ГВ с амплитудой, превышающей заданную, и разделяющий ГВ по фазам. Кроме того, специалистом была вручную выполнена разбивка ГВ по нескольким типам в зависимости от их происхождения, исходя из данных о процессах, происходящих на Солнце, в гелиосфере и в магнитосфере.

Данная работа посвящена сравнению нейросетевых моделей, обученных на различных наборах данных, а также сравнению методов оценки качества нейросетевых моделей на «буревых» наборах данных.

Источники и подготовка данных

Для построения нейросетевых моделей прогноза Dst индекса использовалось погружение временного ряда следующих параметров:

- а) параметры СВ в точке Лагранжа L1 между Землёй и Солнцем:

скорость СВ v (измеряется в км/с);
плотность протонов в СВ n_p (измеряется в см⁻³);
температура плазмы СВ (измеряется в кельвинах);

б) параметры ММП:

B_x (x-компонента ММП);

B_y (y-компонента ММП);

B_z (z-компонента ММП);

амплитуда B (модуль ММП);

в) значения геомагнитного индекса Dst;

г) временные характеристики, связанные с вращением Земли вокруг Солнца и вокруг своей оси.

Данные СВ и ММП использовались с космического аппарата ACE (Advanced Composition Explorer), полученные с приборов SWEPAM и MAG, соответственно [6]. Отметим, что использовались не предобработанные и очищенные данные 2-го уровня (Level 2 Data), предназначенные для научных исследований, а оперативные данные (Browse Data). Это было сделано в связи с тем, что разрабатываемая система прогнозирования предназначена для работы в режиме онлайн, в котором качество получаемых данных соответствует оперативным данным, и нейронные сети следовало обучать для работы с данными именно такого качества.

Ввиду специфики данных, в них могут быть пропуски, для их исключения недостающие значения параметров интерполировались, в случае, если число подряд идущих пропусков не превышало 10. После этого проводилось удаление оставшихся примеров с пропусками, и проводилось погружение временного ряда.

Погружение временного ряда составило 24 часа, что означает использование 25 среднечасовых значений каждого входного параметра, включая текущее значение.

В качестве обучающей выборки использовался массив данных с ноября 1997 года (начало поступления данных с ACE) по март 2014 г.

Полученные наборы данных были размечены в соответствии с разработанным алгоритмом. Были выделены наборы примеров, соответствующие следующим фазам ГВ:

фаза внезапного начала (Sudden commencement), SC;

главная фаза (Main phase), MP;

фаза восстановления (Recovery phase), RP.

Помимо этого, бури в экзаменационном наборе данных размечались специалистом в соответствии со следующими источниками ГВ:

корональные выбросы масс (КВМ);

корональные дыры (КД);
длительные и значимые по амплитуде отрицательные значения z-компоненты ММП (Bz).

Для оценки работы нейросетевых моделей, помимо экзаменационного набора целиком, использовались следующие его подмножества:

- набор, состоящий из примеров со всеми ГВ;
- наборы, состоящие из примеров разных фаз ГВ;
- наборы, состоящие из примеров ГВ по разным источникам;
- набор, состоящий из примеров, описывающих невозмущенное состояние магнитосферы (Отсутствие ГВ)

Нейросетевые модели

В работе сравнивались несколько нейросетевых моделей:
модель, обученная на полном наборе данных («полная»);
модель, обученная на примерах, содержащих ГВ («буревая»);
модели, обученные на примерах из разных фаз ГВ.

Обучающая выборка была разбита на тренировочную, тестовую и экзаменационную. Данные с ноября 1997 г. по конец 2009 г. включительно использовались для тренировочного и тестового наборов, данные разбивались случайным образом в соотношении 75 к 25%. Данные с 2010 по 2014 гг. использовались в качестве общего экзаменационного набора, из которого потом были получены его перечисленные выше подмножества.

Оценка качества проводилась только на наборах данных, соответствующих экзаменационному набору и его подмножествам. Критерий оценки качества вычислялся отдельно для каждого набора данных – соответствующего различным фазам и источникам бурь.

В данной работе сравнивались следующие оценки качества работы моделей:

- коэффициент множественной детерминации R^2 ;
- коэффициент корреляции r ;
- корень из среднего квадрата ошибки – среднеквадратичная ошибка, СКО;
- средняя абсолютная ошибка (CAO).

Архитектура и параметры ИНС

Для всех нейросетевых моделей в данной работе использовалась архитектура многослойного персептрона с 1 скрытым слоем из 32 нейронов. В качестве передаточной функции нейрона использовался гиперболический тангенс.

Нейронная сеть обучалась по алгоритму обратного распространения ошибки со скоростью 0.01 и моментом 0.5. Остановка производилась в случае, если в течение 500 эпох не улучшался результат работы сети на тестовом наборе.

Для каждой модели было обучено по 5 сетей, ответы усреднялись, и для усредненного результата считались оценки качества работы модели.

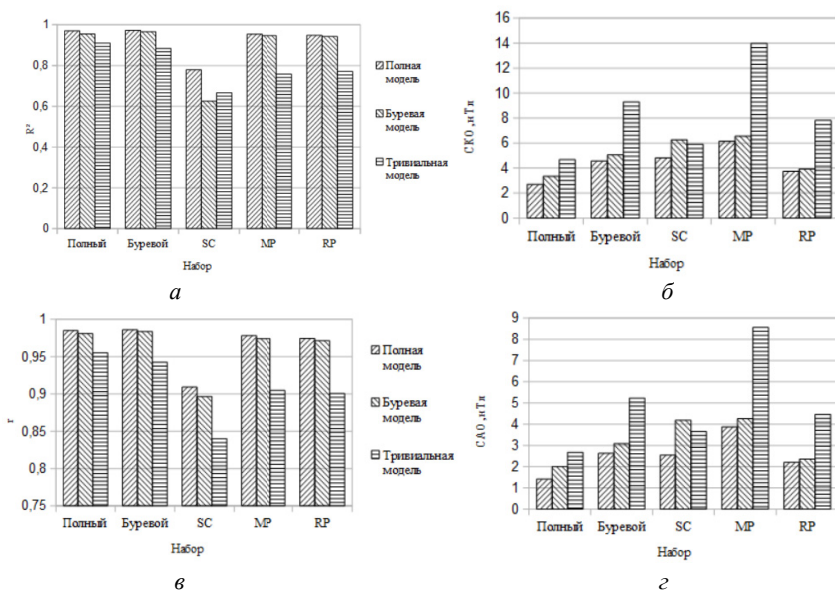


Рис. 1. Значения коэффициента множественной детерминации R^2 (а), СКО (б), коэффициента корреляции r (в) и CAO (г) для разных моделей на полном наборе, буревом наборе (включающем все фазы ГВ) и буревых наборах, разделенных по фазе ГВ

Результаты и их обсуждение

На рис.1 приведено сравнение результатов применения полной и буревой моделей с результатами применения тривиальной модели на полном, буревом и трёх фазовых наборах. Приведены значения коэффициента множественной детерминации R^2 (а), СКО (б), коэффициента корреляции r (в) и CAO (г). Видно, что СКО даёт наиболее контрастные значения и для данной задачи выглядит наиболее информативным.

Под фазовой моделью на рис. 2 подразумевается комбинация трех различных нейросетевых моделей, каждая из которых была обучена на при-

мерах, соответствующих одной из трех фаз ГВ. При применении фазовой модели выбирается та из них, которой соответствует данный пример.

Как видно из рис. 2, модели, обученные как на буревом наборе, так и на фазовых наборах данных, показывают худший результат, чем модель, обученная на полном наборе. Скорее всего, это связано с тем, что ГВ с максимальной амплитудой ниже порога, установленного для алгоритма отбора ГВ (в данном случае, – 50 нТл), отсутствуют в буревом и фазовых наборах и не используются соответствующими сетями при обучении. Это и приводит к ухудшению модели, так как в отбрасываемых примерах могут присутствовать закономерности, описывающие происходящие ГВ.

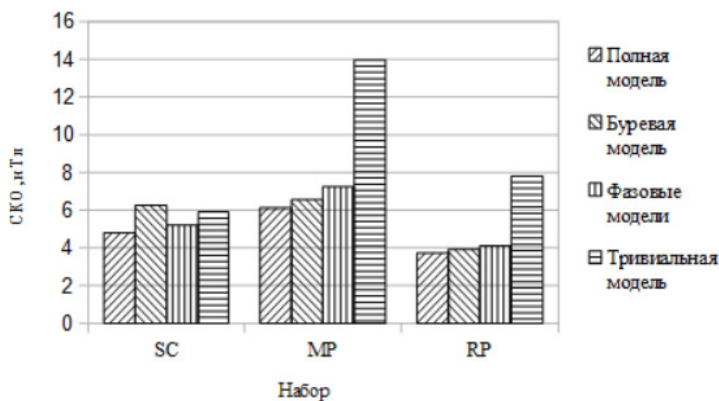


Рис. 2. Значения СКО для разных моделей на буревых наборах, соответствующим различным фазам ГВ

На рис. 3, 4 представлены значения СКО для полной и тривиальной моделей на буревых наборах, разделённых по источнику и по фазе ГВ. Из анализа рисунков видно, что фазы восстановления (RP) и внезапного начала (SC) прогнозируются заметно лучше главной фазы (MP), что можно объяснить большим числом примеров, соответствующим данным фазам в наборах, так как данные фазы длятся, в среднем, дольше главной фазы. При анализе типа источника бури можно сказать, что лучше всего прогнозируются бури, возникшие при больших отрицательных значениях V_z .

Таким образом, показано, что при построении систем оперативного мониторинга и прогнозирования Dst индекса нет необходимости в разделении данных по фазам ГВ и построении классификаторов, предсказывающих данные фазы в режиме реального времени по отдельности. Вид-

но, что единая модель, обученная на всех данных, работает на всех наборах данных лучше, чем модели, обученные на полном буревом наборе и фазовых наборах. Это подтверждается в том числе и тем, что на некоторых наборах ошибка буревой модели больше, чем ошибка тривиальной модели, например на наборе, соответствующему примерам, содержащим SC фазу ГВ.

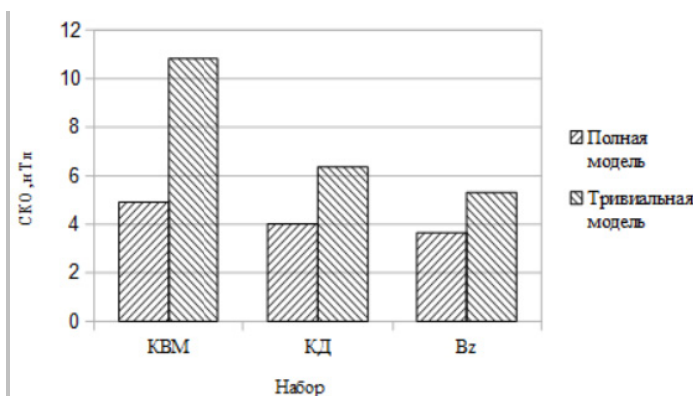


Рис. 3. Значения SKO для полной и тривиальной моделей на буревых наборах, разделенных по типу источника ГВ

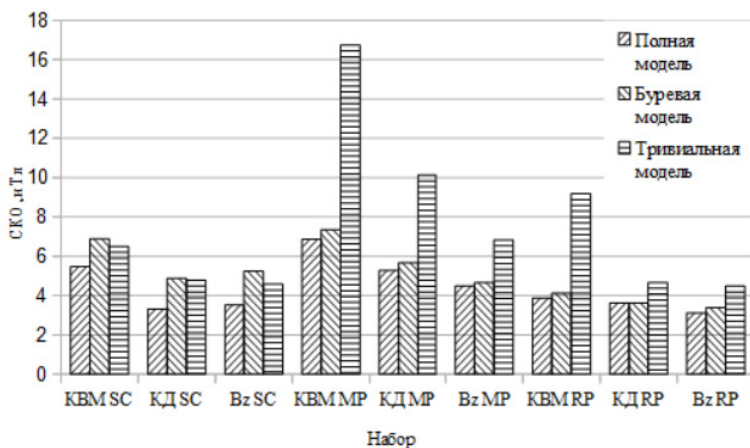


Рис. 4. Значения SKO для разных моделей на буревых наборах, разделенных по типу источника ГВ и фазе

Нами также была получена модель, обученная на данных, соответствующих невозмущенному состоянию магнитосферы. Сравнение данной модели с полной и тривиальной показано на рис. 5. При сравнении ее с полной моделью видно, что она не показала такого же значительного ухудшения качества прогнозирования на соответствующем наборе данных, как буревая и фазовая модели. Это подтверждает возможность наличия скрытых закономерностей в данных, соответствующих невозмущенному состоянию магнитосферы.

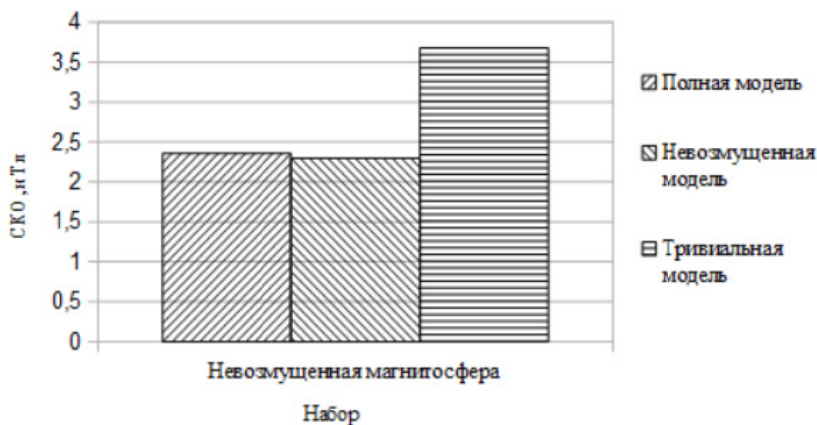


Рис. 5. Значения RMSE для различных моделей на невозмущенном наборе данных

Выводы

В работе описаны некоторые новые аспекты решения задачи нейросетевого прогнозирования состояния магнитосферы на примере Dst индекса.

Показано, что показатель СКО обладает наибольшей контрастностью среди рассмотренных и хорошо подходит для оценки качества модели на буревых наборах. Отметим, что на наборах данных, содержащих мало ГВ, все показатели дают малоконтрастную картину, в связи с тем, что в отсутствие ГВ тривиальный прогноз и другие прогнозирующие модели дают одинаково хорошие результаты.

Разработан специальный алгоритм автоматической разметки ГВ, выделяющий из полного набора данных примеры, соответствующие ГВ с амплитудой, превышающей заданную, и разделяющий ГВ по фазам. Планируется подробное описание этого алгоритма и результатов его работы в отдельной публикации.

Показано, что при обучении на буревых и фазовых наборах данных не удается получить нейросетевые модели, которые бы показывали лучшее качество прогноза, чем модель, обученная на всех данных.

Сделано предположение о том, что в данных, соответствующих невозмущенному состоянию магнитосферы Земли, могут содержаться закономерности, важные для прогнозирования ГВ, в связи с чем для достижения наилучших результатов прогнозирования эти данные необходимо включать в обучающую выборку.

Автор выражает благодарность С.А. Доленко, И.Н. Мягковой и И.Г. Персианцеву за ценные рекомендации и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Myagkova I.N., Shugay Yu S., Veselovsky I.S., Yakovchouk O.S. Comparative analysis of recurrent high-speed solar wind streams influence on the radiation environment of near-earth space in april–july 2010. //Solar System Research, 2013. 47(2). P.141–155.
2. Романова Н.В., Пилипенко В.А., Ягова Н.В., Белов А.В. Статистическая связь частоты сбоев на геостационарных спутниках с потоками энергичных электронов и протонов // Космические исследования, 2005. Т. 43. № 3. С. 186–193.
3. Интернет-портал Всемирного Центра Данных (Geomagnetic Equatorial Dst Index Home Page). URL: <http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/dstdir/index.html>
4. Страница предоставления данных по геомагнетизму Всемирного Центра Данных в Киото (Geomagnetic Data Service). URL: <http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/wdc/Sec3.html>
5. Dolenko, S.A., Orlov, Yu.V., Persiantsev, I.G., Shugai, Ju.S. Neural Network Algorithm for Events Forecasting and Its Application to Space Physics Data // Lecture Notes in Computer Science, 2005. V. 3697. P. 527-532.
6. Caltech, Advanced Composition Explorer Science Center. <http://http://www.srl.caltech.edu/ACE/ASC/>

В.А. СВЕТЛОВ¹, И.Г. ПЕРСИАНЦЕВ², Ю.С. ШУГАЙ²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобелыцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
svetlov.vsevolod@gmail.com

ТЕСТИРОВАНИЕ НОВОЙ ПРОГРАММНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА АДАПТИВНОГО ПОСТРОЕНИЯ ИЕРАРХИЧЕСКИХ НЕЙРОСЕТЕВЫХ КЛАССИФИКАТОРОВ

В работе представлено развитие алгоритма адаптивного построения иерархических нейросетевых классификаторов на основе автоматической модификации желаемого ответа перцептронов с небольшим количеством нейронов в единственном скрытом слое. Проведенное тестирование новой программной реализации данного подхода показало, что рассматриваемый алгоритм более эффективен по вычислительной стоимости и качеству решения задач классификации по сравнению со стандартным многослойным перцептроном.

Ключевые слова: *нейронные сети, иерархические структуры, классификация, иерархические нейросетевые классификаторы.*

V.A. SVETLOV¹, I.G. PERSIANTSEV², YU.S. SHUGAY²

¹Lomonosov Moscow State University

²Skobel'syn Institute of Nuclear Physics Lomonosov Moscow State University

TESTING OF NEW SOFTWARE IMPLEMENTATION OF ALGORITHM FOR ADAPTIVE CONSTRUCTION OF HIERARCHICAL NEURAL NETWORK CLASSIFIERS

The article presents development of the algorithm for adaptive construction of hierarchical neural network classifiers based on automatic modification of the desired output of perceptrons with small number of neurons in the single hidden layer. The conducted testing of the new program implementation of this approach is demonstrated that the considered algorithm was more computationally efficient and provided higher solution quality for classification problems in comparison with standard multi-layer perceptron.

Keywords: *neural networks, neural trees, hierarchical structures, classification, hierarchical neural network classifiers.*

Введение

Классические алгоритмы для решения задач классификации и распознавания образов при помощи нейронных сетей (НС) имеют некоторые принципиальные ограничения, из которых можно выделить наиболее важные для практического применения:

1. Субъективность выбора модели обучения – зачастую не существует метода для автоматического выбора параметров модели, таких как количество скрытых слоев, количество нейронов в скрытых слоях, скорость обучения и момент. Для применения модели к реальным данным обычно эти параметры подбираются эмпирическим методом, основываясь на общепринятых методиках и собственном опыте, что далеко не всегда позволяет получить наиболее качественную модель.

2. Попадание в локальный минимум функционала ошибки при обучении. При ручном выборе параметров модель оказывается не оптимальной и обладает склонностью к попаданию в локальный минимум при обучении, что означает неверное выделение моделью признаков, ведущее к неправильным результатам. Для решения данной проблемы часто требуется переучить НС несколько раз и выбрать оптимальное решение среди полученных. Этот метод является очень затратным по отношению к вычислительным ресурсам и не гарантирует выбор действительно оптимальной модели для решения конкретной задачи.

3. Ухудшение качества обучения при решении задач множественной классификации, в случае, когда количество классов становится достаточно большим. В ряде случаев удается улучшить результаты за счет усложнения модели. К примеру, в ситуации, когда есть достаточное количество данных в тренировочном наборе, НС для улучшения результата может оказаться достаточно увеличить количество скрытых слоев или нейронов. К сожалению, чаще всего в этом случае даже при многократной тренировке модели не удастся получить приемлемого качества классификации.

4. В случае задач множественной классификации время обучения увеличивается непропорционально, так как НС, способная разделить большое количество выходных классов, должна иметь достаточно сложную архитектуру и, соответственно, большое количество весовых коэффициентов.

Для решения данных проблем в лаборатории авторов был разработан алгоритм построения иерархического нейросетевого комплекса, который позволяет свести задачу множественной классификации с большим количеством выходных классов к последовательному решению многих задач с гораздо меньшим количеством выходных признаков [1-3]. Алгоритм со-

стоит из двух этапов: обучение многослойного персептрона (МСП) на тренировочном наборе с объединением "похожих" классов в одну группу; обучение МСП следующего уровня иерархии с использованием той же стратегии для классов из каждой группы предыдущей сети. Используемая иерархическая схема позволяет адаптивно наращивать размер структуры; при этом количество классов в каждой из групп остается небольшим.

Целью данной работы являлось исследование и улучшение описанного в [1-3] алгоритма, а также создание его улучшенной программной реализации в свете увеличения вычислительных возможностей и естественной склонности алгоритма к параллелизации.

Модульная структура

При замене одной «большой» НС, ответственной за распознавание всех классов, которые необходимо классифицировать, системой модулей, каждый из которых ответственен за классификацию лишь части исходных классов, происходит замена сложной функции аппроксимации комбинацией более простых функций. Так как архитектура каждого модуля может быть при этом более простой, чем архитектура "большой" одиночной сети, можно ожидать, что весь комплекс будет иметь меньшую склонность к переучиванию и попаданию процедуры оптимизации весовых коэффициентов в локальные минимумы. Общее сокращение количества весовых коэффициентов по сравнению с одиночной сетью также положительно влияет на возможности обобщения классификатора и на скорость обучения. В силу простоты каждого из модулей становится легче анализировать признаки, выделенные в скрытом слое НС из входных данных. Из плюсов данного подхода также можно отметить то обстоятельство, что при правильной стратегии обучения каждый модуль должен распознавать лишь часть классов, «похожих» друг на друга, выдавая отказ от распознавания для примеров из всех остальных классов, благодаря чему можно обеспечить замену части ложных классификаций на отказы от распознавания. Это также приводит к упрощению задачи обучения каждого модуля.

Одним из основных подходов к построению такой модульной структуры является базовый гибридный алгоритм, включающий в себя объединение НС с семейством алгоритмов «дерево решений» – каждым листом решающего дерева является НС. В литературе такой тип алгоритмов часто называют нейросетевым деревом решений – НСД. В данной области можно отметить ряд работ, авторы которых попытались улучшить качество получаемого классификатора путём различных модификаций базового алгоритма.

В работе [4] была предложена модель НСД, способная подстраивать свою структуру при изменении поступающих данных. Модель совмещает соревнование между НС и структурную адаптацию во время обучения. Авторы работы [5] взяли за основу работу [4], но в качестве узлов вместо МСП использовались самоорганизующиеся карты Кохонена. В работе [6] использовались сбалансированные бинарные деревья для уменьшения структуры дерева. Авторы работы [7] также использовали бинарное сбалансированное дерево, применив при этом нестандартные критерии остановки, основанные на текущей структуре дерева.

В отличие от базового алгоритма, в котором каждый узел дерева обучается отдельно от остальных, авторы [8] производят глобальную подстройку весов внутри всего дерева путём минимизации общей ошибки классификации.

Рассматриваемый в настоящей работе алгоритм построения иерархических нейросетевых классификаторов (ИНК) основан на использовании МСП с желаемыми ответами, модифицируемыми в процессе обучения. Результатом является адаптивное построение древоподобной модульной структуры, осуществляемое в процессе обучения на основе обучающей выборки данных, одновременно с обучением НС.

Иерархический нейросетевой классификатор

В случае МСП каждый нейрон в скрытом слое проводит гиперплоскость, которая разделяет примеры по наличию того или иного признака в данных, выделенных на предыдущем слое, то есть количество нейронов соответствует количеству выделенных признаков. Очевидно, что при числе нейронов в скрытом слое ниже определенного порога МСП не сможет выделить достаточное количество признаков для корректного разделения классов. МСП начнет ошибаться на примерах из похожих по выделенным в скрытом слое признакам классов. Можно ожидать, что выделенные признаки являются наиболее существенными, и на основе этих признаков можно делать предположения о «похожести» классов для объединения их в группы.

Рассматриваемый алгоритм построения ИНК относится к последовательной модульной схеме – каждый модуль решает свою собственную независимую подзадачу, при этом в формировании окончательного решения последовательно участвуют несколько модулей. Алгоритм имеет структуру нейросетевого дерева – каждый лист дерева является МСП, который, как и в алгоритме дерева решений, определяет, к какому из под-деревьев относится данный пример. Такая архитектура позволяет частич-

но избавиться от зависимости результата обучения от фиксированных predetermined параметров одиночной сети, адаптивно создавая структуру ИНК в зависимости от данных и от параметров отдельной сети.

Алгоритм состоит из двух частей.

1. Обучение узла нейросетевого дерева. Строится МСП с заведомо недостаточным для корректного разделения всех классов задачи количеством нейронов в скрытом слое. На данном шаге МСП обучается при помощи стандартного метода обратного распространения ошибки, и каждые n эпох производится анализ статистики ответов МСП на примеры из тренировочного набора. Исходя из полученной статистики, если большая часть примеров, относящихся к некоторому классу C_1 , были распознаны нейронной сетью как примеры из класса C_2 , то класс C_1 объединяется в группу с классом C_2 , и при дальнейшем обучении данного МСП считается, что все примеры, относящиеся к C_1 , относятся к C_2 . Критерием остановки обучения является ошибка на тестовом наборе данных – если она не уменьшается в течение заранее заданного количества эпох (вне зависимости от процедур слияния классов), то обучение прекращается.

2. После обучения конкретного узла происходит анализ групп классов, полученных в процессе обучения. Для каждой группы, состоящей из двух и более классов, строится узел по схеме, описанной в пункте 1. При этом в обучении узла используются все примеры из исходного набора данных, которые принадлежат классам из данной группы, а также часть остальных примеров, для которых желаемым ответом устанавливается нулевая активность всех нейронов выходного слоя. Каждый из классов, который по окончании обучения узла оказывается единственным в своей группе, считается распознанным.

Отметим следующие особенности данного алгоритма:

- В каждом узле решается задача адекватной сложности – либо распознавание классов, представленных для обучения в данном узле, либо разбиение их на группы, чтобы попытаться решить задачу распознавания на следующем уровне иерархии.
- Качество получаемого классификатора слабо зависит от архитектуры МСП в узлах – алгоритм сам изменяет структуру дерева в зависимости от качества классификаторов в узлах.
- Изменение параметров МСП в узлах позволяет косвенным образом влиять на топологию получаемого дерева, не задавая её непосредственно.
- Модификация указанным способом желаемых ответов в тренировочном наборе при обучении каждого узла сильно ускоряет сходимость обучения.

Программная реализация

В свете увеличения вычислительных мощностей и того, что описанный алгоритм естественным образом подходит для параллельных вычислений, была создана новая программная реализация данного алгоритма на языке C++11 [9] в виде набора из динамической библиотеки и консольной утилиты, осуществляющей базовую функциональность, необходимую для исследований описанного алгоритма. В качестве реализации МСП взята стандартная библиотека FANN [10].

Из особенностей данной реализации можно отметить способность к параллельному обучению модулей ИНК, возможность простого применения уже обученных НС к новым наборам данных, задание параметров для тренировки и применения при помощи конфигурационных файлов json, отказоустойчивость процедуры обучения (автоматическое сохранение результатов и возможность продолжения обучения после аппаратного сбоя) и полную переносимость кода между популярными платформами.

Численные эксперименты

В каждом из численных экспериментов для обучения узлов использовались значения скорости обучения, равной 0.01, и момента, равного 0.9. Тесты проводились на одной модельной и двух эталонных реальных задачах, доступных по сети Интернет.

1. Задача «Кантор» (одномерное распределение Кантора) [3] – модельная задача, в которой интервал $[0, 1.8]$ разделен на 180 одинаковых сегментов. Задача состоит в классификации кривых Гаусса с полушириной 0.1 и единичной амплитудой, расположенных в этом интервале. Признаком, определяющим принадлежность образа к тому или иному классу, являлась координата его максимума, а максимумы обучающей выборки распределены в соответствии с фрактальным распределением Кантора.

Алгоритм показал отличное качество классификации для этой модельной задачи при минимальном количестве нейронов в скрытом слое (СС) МСП узлов (рис. 1).

Процент правильного распознавания на экзаменационном наборе данных составил 100 %. Структура ИНК получилась достаточно сбалансированной, что соответствует исходным представлениям о структуре изучаемых данных. Дальнейшие эксперименты с данной задачей показали (рис. 2), что увеличение числа нейронов в СС, как и ожидалось, ведет к увеличению числа классов, распознаваемых в каждом узле, что в целом снижает качество полученного классификатора. Отметим, что с данной

задачей легко справляется и обычный МСП с 40 нейронами в СС, но для его обучения требуется почти в 2 раза больше времени.

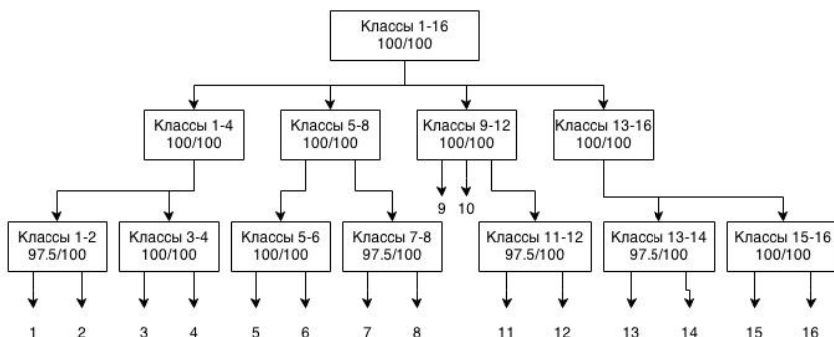


Рис. 1. Иерархическая структура, полученная при решении задачи «Кантор» с 2 нейронами в скрытом слое. Процент правильной классификации ИНК на тренировочном наборе – 98,4 %, на тестовом наборе – 100 %.

Здесь и на остальных рисунках для каждого узла показан процент правильной классификации этого узла на тренировочном и тестовом наборах данных

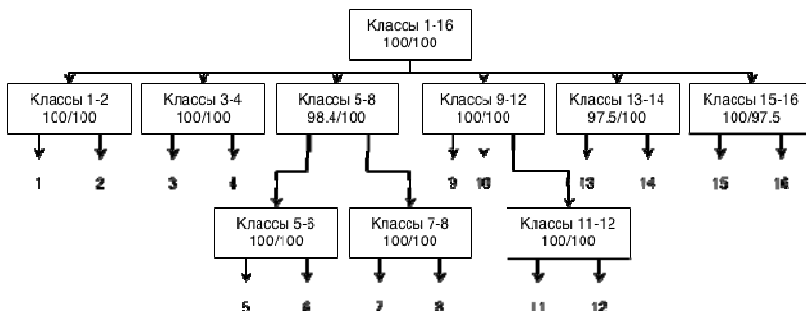


Рис. 2. Иерархическая структура, полученная при решении задачи «Кантор» с 3 нейронами в скрытом слое. Процент правильной классификации ИНК на тренировочном наборе – 98,1 %, на тестовом наборе – 99,3 %

2. Задача «Текстуры» [11] – реальная задача по распознаванию текстур, содержит 11 классов и 40 входных признаков. Данные приводились к нулевому среднему и единичному стандартному отклонению.

На данной задаче алгоритм также показал хорошие результаты (рис. 3). Процент правильного распознавания на экзаменационном наборе данных составил 99,8 %. В силу того, что количество примеров в данной

задаче достаточно велико и составляет 5500, для получения схожего качества классификации при помощи одиночной нейронной сети потребовалось обучение МСП с 50 нейронами в скрытом слое, что заняло в несколько раз больше времени, чем обучение ИНК. Помимо этого, на данной задаче видно, что далеко не всегда структурой ИНК является сбалансированное дерево, и то, что данный факт не сказывается на качестве получаемого классификатора. Увеличение числа нейронов СС в узлах ИНК, как и в предыдущей задаче, приводит к ухудшению получаемого классификатора.

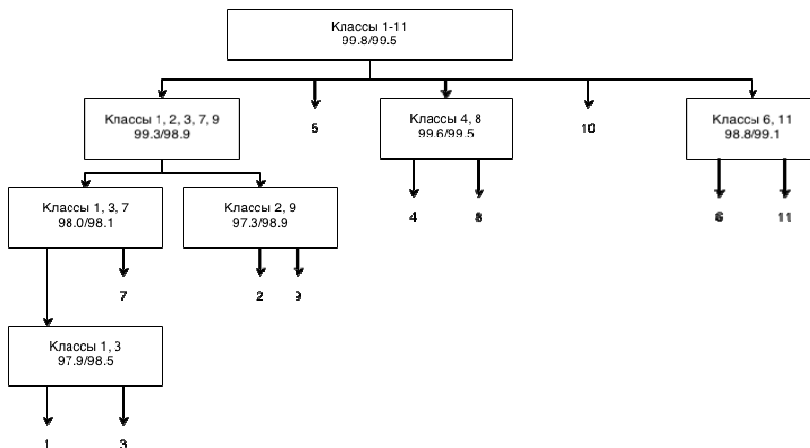


Рис. 3. Иерархическая структура, полученная для задачи «Текстуры» с 4 нейронами в скрытом слое. Процент правильного распознавания ИНК на тренировочном наборе – 98,62 %, на тестовом наборе – 98,83 %

3. Задача «Гласные» [12] – реальная задача по распознаванию гласных звуков, исследованная в работах [2-3], содержит 11 классов и 10 входных признаков. Данные приводились к нулевому среднему и единичному стандартному отклонению.

На данной задаче можно увидеть преимущество модульного подхода над одиночными сетями, анализ которых был произведен в работах [2-3]. Качество полученного классификатора (Рис. 4) оказалось выше, чем у лучшего нейросетевого классификатора, полученного в оригинальной работе [2] (51 %). Процент правильного распознавания на экзаменационном наборе данных составил 59,82 %. Таким образом, для одиночных сетей порой оказывается невозможным достичь такого же уровня правиль-

ной классификации, как для гибридных модульных схем. Также можно отметить улучшение качества обучения по сравнению с предыдущей программной реализацией данного алгоритма (56,2 %) [3].

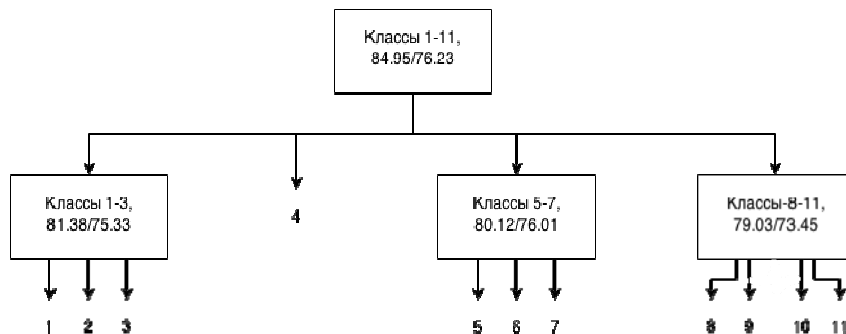


Рис. 4. Иерархическая структура, полученная для задачи «Гласные» с 3 нейронами в скрытом слое. Процент правильной классификации ИНК на тренировочном наборе – 68,21 %, на тестовом наборе – 58,79 %

Выводы

Создана новая программная реализация предложенного ранее авторами алгоритма адаптивного построения иерархических нейросетевых классификаторов на основе последовательной автоматической модификации желаемого ответа персептрона с небольшим количеством нейронов в единственном скрытом слое. Полученная программная реализация обладает необходимыми средствами для исследования, усовершенствования и отладки модифицированного алгоритма.

Показано, что получаемая в результате работы алгоритма иерархическая структура обладает заметными преимуществами над одиночными МСП по скорости обучения и точности решения задач классификации. Преимущества увеличиваются при увеличении количества распознаваемых классов.

При тестировании алгоритма и его новой программной реализации на известных задачах получены следующие результаты на экзаменационном наборе данных: процент правильных распознаваний для задачи «Кантор» – 100%, для задачи «Текстуры» – 99.8%, для задачи «Гласные» – 59.82%. Для задач «Кантор» и «Текстуры» одиночные МСП обладают таким же качеством классификации; для задачи «Гласные» лучший из построенных

МСП классифицирует объекты из экзаменационного набора на 6 процентных пунктов хуже, чем нейросетевое дерево, построенное по алгоритму ИНК.

Авторы выражают благодарность С.А. Доленко и Ю.В. Орлову за участие в разработке алгоритма и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Dolenko S.A., Orlov Yu.V., Persiantsev I.G., Shugai Ju.S., Eremin E.K. The perceptron-based hierarchical structure of classifiers constructed by the adaptive method. // Pattern Recognition and Image Analysis, 1997. V. 7. No.1, P. 24-28.
2. Орлов Ю.В. Разработка и исследование алгоритмов построения нейросетевых комплексов для классификации данных физических измерений. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук, НИИЯФ МГУ, 2003.
3. Персианцев И.Г. Адаптивное построение иерархических нейросетевых систем для классификации и для сегментации временных рядов. // XII Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2010»: Лекции по нейроинформатике. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. С. 212-242.
4. Tao Li, Tang Yuan Y., Fang L.Y., A structure-parameter-adaptive (SPA) neural tree for the recognition of large character set // Pattern Recognition, 1995. V. 28. No. 3. P. 315–329.
5. Song H.H., Lee S.W. A self-organizing neural tree for large-set pattern classification. // IEEE Trans. Neural Networks, 1998. V. 9. No. 3. P. 369-380.
6. Christian M., Asha R., Sanjeev K., Gian L.F. A balanced neural tree for pattern classification. // Neural Networks, 2012. V. 27. P. 81–90.
7. Kryzhanovsky V., Malsagov M., Tomas J.A.C. Hierarchical classifier based on neural networks searching tree with iterative traversal and stop criterion. // Optical Memory and Neural Networks, 2013. V. 22, No. 4. P. 217-223.
8. Foresti G.L., Micheloni C. Generalized Neural Trees for Pattern Classification. // IEEE Trans. Neural Networks, 2002. V. 13. No. 6. P. 1540-1547.
9. C++11, <http://www.open-std.org/jtc1/sc22/wg21/>
10. FANN C library, <http://leenissen.dk/fann/wp/>
11. Задача «Текстуры». ELENA: Enhanced Learning for Evolutive Neural Architecture. ESPRIT Basic Research Project Number 6891. <http://mlg.info.ucl.ac.be/index.php?page=Elena>
12. Задача «Гласные». UCI Machine Learning Repository. <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Connectionist+Bench+%28Vowel+Recognition+-+Deterding+Data%29>

О.В. СЕНИУКОВА¹, Д.С. ЗОБНИН¹, А.В. ПЕТРЯЙКИН²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²НИИ цереброваскулярной патологии и инсульта Российского национального
исследовательского медицинского университета им. Н.И. Пирогова, Москва
osenyukova@graphics.cs.msu.ru

АЛГОРИТМ СОПОСТАВЛЕНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ ГОЛОВНОГО МОЗГА ЧЕЛОВЕКА НА ОСНОВЕ КЛЮЧЕВЫХ ТОЧЕК

Рассматривается задача регистрации (сопоставления) МРТ-изображений головного мозга человека. Входными данными задачи является пара МРТ-изображений разных субъектов, и требуется найти такое преобразование первого изображения, которое сделает его максимально похожим на второе изображение, с учетом анатомических особенностей. Статья посвящена описанию алгоритма регистрации на основе ключевых точек на изображениях с применением сплайнового преобразования. Предложенный алгоритм реализован и исследуется.

Ключевые слова: *регистрация изображений, медицинские изображения, МРТ, ключевые точки.*

O.V. SENYUKOVA¹, D.S. ZOBIN¹, A.V. PETRAIKIN²

¹Lomonosov Moscow State University

²Pirogov Russian National Research Medical University (RNRMU), Moscow

BRAIN MRI REGISTRATION ALGORITHM BASED ON KEY POINTS MATCHING

This work is devoted to the problem of registration (matching) of human brain MRI. In order to register two input brain MR images of different subjects, one should find such a transformation of the first image that makes it the most similar to the second image. Anatomical features should be taken into account. The paper describes the registration algorithm based on key points matching using spline transform. The proposed algorithm was implemented and tested on real data.

Keywords: *image registration, medical images, MRI, key points.*

Введение

Задача регистрации (сопоставления) двух изображений магнитно-резонансной томографии (МРТ) заключается в нахождении такого преобразования первого изображения, что результат максимально похож на второе изображение. В контексте медицинских изображений особенно важно добиться максимально возможного сопоставления анатомических структур, так как зачастую регистрация является промежуточным этапом в различных задачах анализа изображений, например, задачах автоматической разметки на анатомические структуры или выявления патологии. Для автоматического выделения анатомических структур производится регистрация МРТ-изображения мозга с атласом – изображением с экспертной разметкой – чтобы затем перенести разметку из атласа на изображение.

Учитывая высокую степень вариабельности анатомических структур головного мозга в норме, а также необходимость работы с изображениями при патологических состояниях (например, при травме), особую роль в регистрации играют нелинейные преобразования, способные моделировать локальные деформации, в том числе, небольших по объему глубоких структур. В статье рассматривается преобразование, основанное на D^m –сплайнах.

Также следует отметить, что алгоритмы, основанные на оптимизации метрики схожести, вычисляемой по интенсивности, чувствительны как к шуму, так и к пикселям, не принадлежащим объекту. Например, пиксели поверхностных тканей на МРТ-изображениях могут привести к ошибкам регистрации. В статье описывается применение ключевых точек для расчета параметров преобразования, что позволяет сопоставлять интересующие структуры с высокой степенью точности, не сталкиваясь с описанными выше проблемами. Помимо ключевых точек, соответствующих характерным особенностям анатомических структур, предлагается указывать и несколько граничных точек, чтобы хорошо сопоставлялись не только глубокие структуры мозга, но и мозг целиком. Предлагаются различные варианты автоматизации поиска ключевых точек.

Постановка задачи

МРТ-изображение A определяется как отображение

$$A: \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \rightarrow A(\vec{x}) \in \mathbb{R},$$

где вектор $\vec{x} = [x \ y \ z]^T$ задает координаты точки в трехмерном пространстве, а $A(\vec{x})$ соответствует значению интенсивности в этой точке.

Набор ключевых точек на изображении представляет собой множество

$$\vec{P}^A = \{\vec{p}_1^A, \dots, \vec{p}_N^A\}$$

где $\vec{p}_i = [p_x \ p_y \ p_z]^T$ – координаты точки с индексом i , N – количество ключевых точек.

На вход алгоритму подаются два изображения, A и B , и наборы ключевых точек, $\vec{P}^A$ и $\vec{P}^B$.

Выходом алгоритма является изображение A' , преобразованное таким образом, что позиции ключевых точек $\vec{P}^A$ максимально близки к позициями ключевых точек $\vec{P}^B$.

Обзор существующих методов

Существующие методы регистрации можно классифицировать по нескольким критериям ([1]).

Во-первых, разделим методы регистрации по принципу работы (табл. 1).

Таблица 1

Классификация методов регистрации по принципу работы

Методы регистрации	
Основанные на интенсивности	Основанные на локальных особенностях
Используют метрики схожести на основе интенсивности Kim, 2004 [2], Xing et al., 2011 [3]	Устанавливают соответствие между наборами локальных особенностей (точки, края, контуры) Lin et al., 2009 [4], Guerrero et al., 2012 [5]

Методы, основанные на интенсивности, вычисляют параметры преобразования путем оптимизации метрики схожести двух изображений. Недостатками такого подхода являются чувствительность к шуму и вычислительная сложность при расчете преобразований с большим количеством параметров.

Методы, основанные на локальных особенностях, вычисляют параметры преобразования для заданного набора точек в пространстве. Такие алгоритмы не испытывают влияния шума, однако, зависят от определения локальных особенностей, например, ключевых точек, что может быть сделано либо вручную экспертом, либо автоматически, как в работе [5].

Во-вторых, методы регистрации различаются по типу преобразований, которые используются для сопоставления изображений (табл. 2).

Классификация методов по типу преобразования

Преобразования изображений	
Линейные	Свободные
<i>Глобальны (деформируют изображение целиком): смещение, вращение, масштабирование, аффинное преобразование</i> Maes et al., 1997 [6], Fei et al., 2002 [7], Ding et al., 2001 [8]	<i>Способны моделировать произвольные деформации, в том числе, локальные</i> Avants et al., 2008 [9], Ashburner, 2007 [10]

Линейные преобразования описывают жесткие (сохраняющие форму объекта) и аффинные деформации. Эти функции не моделируют локальные изменения, однако, могут быть успешно использованы в качестве начального приближения для нелинейного преобразования, так как имеют небольшое количество параметров и быстро вычисляются.

Свободные (нелинейные) преобразования широко используются при регистрации медицинских изображений, так как способны моделировать локальные изменения (что позволяет сопоставлять, например, внутренние структуры мозга). Эти методы имеют большое количество параметров и вычислительно сложны, особенно, когда применяются к трехмерным изображениям.

Наконец, методы регистрации различаются по таким критериям, как метрики схожести, алгоритмы оптимизации, а также области применения (мономодальная или мультимодальная регистрация).

Описание алгоритма

Предложенный алгоритм позволяет сопоставлять как отдельные пары срезов МРТ, так и трехмерные изображения целиком.

Для того, чтобы обеспечить максимальное сопоставление наиболее важных анатомических структур, необходимо определить набор ключевых точек. Ключевые точки, относящиеся к глубоким анатомическим структурам, должны иметь уникальную окрестность, которая позволит их легко идентифицировать и отличить от других точек. Для каждой конкретной задачи может определяться свой набор ключевых точек, в зависимости от того, какие области мозга являются наиболее важными в данном исследовании. В то же время, для того, чтобы хорошо сопоставились не только определенные анатомические структуры, но и объем мозга в це-

лом, предлагается определить дополнительные ключевые точки на границах мозга – как минимум, определяющие ограничивающий прямоугольник (bounding box).

Наиболее надежный способ расстановки ключевых точек – вручную. Но при большом количестве точек, тем более, для трехмерного случая, задача может оказаться трудоемкой. Поэтому предлагается исследовать применимость различных дескрипторов, таких как SIFT [11] и SURF [12] для автоматизации поиска ключевых точек. Если изображения предварительно сопоставлены алгоритмом линейной регистрации и для одного из изображений ключевые точки размечены вручную, то область поиска каждой ключевой точки на втором изображении можно ограничить некоторой окрестностью вокруг местоположения соответствующей ей точки на первом изображении. Это повысит скорость и точность нахождения ключевых точек.

Рассмотрим задачу расчета параметров преобразования по заданным наборам ключевых точек.

В качестве нелинейного преобразования были выбраны сплайн-поверхности (D^m –сплайны, *thin-plate splines*) [13], [14]. Интерполяционным D^m –сплайном называют функцию $\varphi(t)$, $t \in R^n$, являющуюся решением вариационной задачи минимизации потенциальной энергии упругой тонкой пластины.

Рассмотрим трехмерный случай: пусть заданы ключевые точки

$$\vec{p}_i \text{ и } \vec{q}_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad \vec{p}_i = [p_{i1} \ p_{i2} \ p_{i3}]^T$$

на первом и втором изображениях соответственно. Определим

$$\vec{d}_i = \vec{q}_i - \vec{p}_i. \quad (1)$$

Преобразование

$$\vec{d}(\vec{x}) = [d_1(\vec{x}) \ d_2(\vec{x}) \ d_3(\vec{x})]^T,$$

где $\vec{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$, должно быть определено так, чтобы выполнялось $\vec{d}(\vec{p}_i) = \vec{d}_i$.

Можно показать, что искомое преобразование может быть найдено в виде линейной комбинации ([2])

$$\vec{d}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N G(\vec{x} - \vec{p}_i) \vec{c}_i + A\vec{x} + \vec{b}, \quad (2)$$

где

$$G(\vec{x}) = [\alpha|\vec{x}|^2 I - 3\vec{x}\vec{x}^T]|\vec{x}|, \quad (3)$$

$$\alpha = 12(1 - \lambda/[2(\mu + \lambda)]) - 1,$$

$\vec{c}_i = [c_{i1} \ c_{i2} \ c_{i3}]^T$ – коэффициенты i -ой составляющей сплайна по осям координат, μ, λ – коэффициенты Ламэ, $\mathbf{I}$ – единичная матрица 3×3 , $\mathbf{A}\vec{x} + \vec{b}$ – аффинная составляющая преобразования:

$$\mathbf{A} = [\vec{a}_1 \ \vec{a}_2 \ \vec{a}_3], \quad \vec{a}_j = [a_{j1} \ a_{j2} \ a_{j3}]^T$$

Составим вектор из неизвестных параметров преобразования:

$$\mathbf{W} = [\vec{c}_1^T \ \dots \ \vec{c}_N^T \ \vec{a}_1^T \ \vec{a}_2^T \ \vec{a}_3^T \ \vec{b}^T]^T \quad 3N + 12 \text{ элементов}$$

Также составим вектор из всех смещений между ключевыми точками:

$$\mathbf{Y} = [\vec{d}_1^T \ \dots \ \vec{d}_N^T \ \mathbf{O}_1^T]^T, \quad 3N + 12 \text{ элементов}$$

где $\mathbf{O}_1$ – колонка из 12 нулей.

Можно показать ([2]), что неизвестные параметры сплайна находятся из решения системы уравнений, матричная запись которой есть

$$\mathbf{W} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{Y}, \quad (4)$$

где матрица $\mathbf{L}$ имеет вид

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{P} \\ \mathbf{P}^T & \mathbf{O}_2 \end{bmatrix}, \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}(\vec{s}_{11}) & \dots & \mathbf{G}(\vec{s}_{1N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}(\vec{s}_{N1}) & \dots & \mathbf{G}(\vec{s}_{NN}) \end{bmatrix}, \mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_{11}\mathbf{I} & p_{12}\mathbf{I} & p_{13}\mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ p_{N1}\mathbf{I} & p_{N2}\mathbf{I} & p_{N3}\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{bmatrix},$$

$\mathbf{O}_2$ – нулевая матрица 12×12 , $\vec{s}_{ij} = \vec{p}_i - \vec{p}_j$.

Применяя сингулярное разложение матрицы и численные методы, решаем систему (4) и находим неизвестные параметры преобразования.

Экспериментальная оценка

Предложенный алгоритм был реализован с помощью Insight Toolkit (ITK) [15] и протестирован на реальных данных. Эксперименты проводились на двумерных и трехмерных изображениях МРТ здорового и травмированного мозга. Ключевые точки были размечены вручную с помощью программы 3DSlicer [16].

На рис. 1 представлены МРТ-изображения двух пациентов с травматическим повреждением головного и отмеченными 25 ключевыми точками, 6 из которых находятся на границе. Срезы взяты из одной и той же области мозга.

На основании экспериментального сравнения 14 алгоритмов нелинейной регистрации [17], на данный момент наилучшие результаты демонстрирует алгоритм SyN (symmetric normalization) [11]. Ниже приведено сравнение алгоритма на основе ключевых точек с алгоритмом SyN.

Как видно из рис. 2 и 3, алгоритм SyN хорошо сопоставляет области с резкими краями, однако, неверно деформирует внутренние структуры мозга, если их границы не четко выражены. Кроме того, поскольку алгоритм оптимизирует метрику схожести, основанную на интенсивности, он

пытается сопоставить все области изображений, в том числе и те, которые сопоставить невозможно в силу значительной анатомической вариабильности, например, извилины коры больших полушарий (рис. 2, *а*).

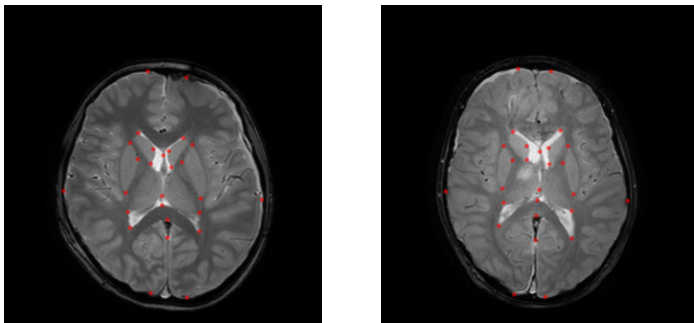


Рис. 1. Входные изображения с отмеченными ключевыми точками

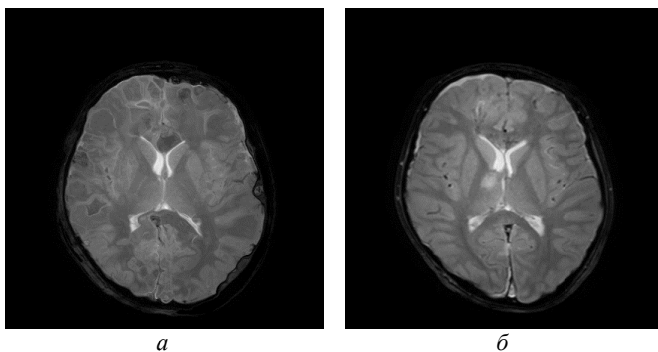


Рис. 2. Сравнение результатов регистрации: SyN (*а*) и предложенный алгоритм (*б*)

В отличие от SyN, предложенный алгоритм преобразует изображение так, чтобы сопоставить наборы ключевых точек, что позволяет добиться более точного сопоставления именно интересующих структур (рис. 3).

Если рассматривать регистрацию как подзадачу в процессе разметки изображений на анатомические структуры (сегментацию), то ключевое значение имеет не столько визуальная схожесть сопоставленных изображений, сколько качество разметки, полученной в результате преобразования. На рис. 4 представлено сравнение результатов сегментации изображений мозга из базы IBSR ([18]).

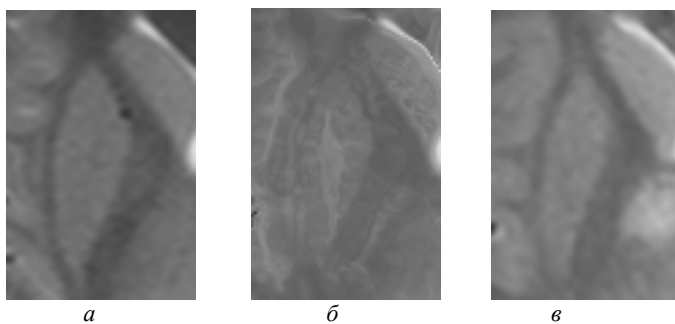


Рис. 3. Сравнение результатов регистрации на внутреннем фрагменте изображений: исходный фрагмент (*a*); SyN (*б*) и предложенный алгоритм (*в*)

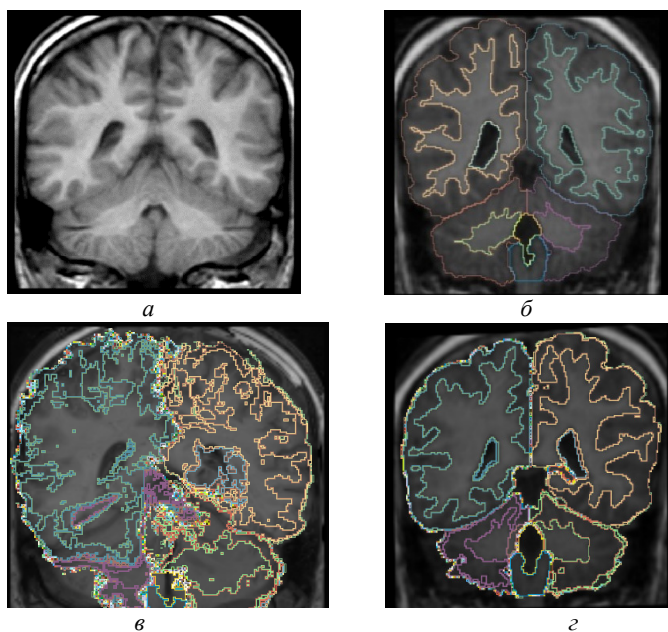


Рис. 4. Сравнение результатов сегментации: исходное изображение (*a*), размеченное изображение (*б*), SyN (*в*) и предложенный алгоритм (*г*)

Если ключевые точки расставляются вручную, то предложенный алгоритм не нуждается в предварительной линейной регистрации, которая необходима методу SyN. Кроме того, в расчете преобразования отсутствует итеративная оптимизация метрики, что позволяет проводить регистрацию в реальном времени (табл. 3).

Таблица 3

Сравнение алгоритмов по времени работы

Размер изображения	SyN	Предложенный алгоритм
512 x 512	30.17 с	0.002 с
256 x 256 x 128	37 мин 19 с	0.024 с

В табл. 3 приведена оценка времени работы методов без учета времени на разметку ключевых точек. Несмотря на то, что разметка точек, безусловно, требует дополнительного времени, полученный результат позволяет значительно ускорить процесс регистрации изображений. Так как расчет и применение преобразования происходит за время, меньшее 0,1 с, эксперт имеет возможность наблюдать результат регистрации в реальном времени, модифицируя отмеченные ключевые точки в случае необходимости или корректируя результат автоматической разметки ключевых точек.

Выводы

Предложен и реализован алгоритм сопоставления МРТ-изображений мозга на основе ключевых точек. Проведенная экспериментальная оценка свидетельствует о том, что предложенный алгоритм позволяет, во-первых, повысить качество результата сопоставления изображений, во-вторых, значительно ускорить процесс регистрации.

Дальнейшие исследования будут включать в себя алгоритмы автоматизированного поиска ключевых точек, использование других локальных особенностей для повышения качества регистрации, а также алгоритмы переноса разметки после регистрации с несколькими атласами.

Список литературы

1. Pluim J.P.W., Maintz J.B.A., Viergever M.A. Mutual-information-based registration of medical images: a survey // IEEE Transactions on Medical Imaging. 2003. V. 22. No 8. P. 986-1004.

2. Kim J. Intensity based image registration using robust similarity measure and constrained optimization: applications for radiation therapy: diss. The University of Michigan, 2004.
3. Xing C., Qiu P. Intensity-based image registration by nonparametric local smoothing // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2011. V. 33. No 10. P. 2081-2092.
4. Lin T. et al. A Landmark-Based Image Registration Model using a Nonlinear Elasticity Smoother for Mapping Mouse Atlas to Gene Expression Data //UCLA CAM Report [09-51], 2009.
5. Guerrero R. et al. Landmark localization in brain MR images using feature point descriptors based on 3D local self-similarities // IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), 2012. P. 1535-1538.
6. Maes F. et al. Multimodality image registration by maximization of mutual information // IEEE Transactions on Medical Imaging., 1997. V. 16. No. 2. P. 187-198.
7. Fei B. et al. Automatic MR volume registration and its evaluation for the pelvis and prostate //Physics in Medicine and Biology, 2002. V. 47. No. 5. P. 823.
8. Ding L., Goshtasby A., Satter M. Volume image registration by template matching //Image and Vision Computing, 2001. V. 19. No. 12. P. 821-832.
9. Avants B. B. et al. Symmetric diffeomorphic image registration with cross-correlation: evaluating automated labeling of elderly and neurodegenerative brain //Medical image analysis, 2008. V. 12. No. 1. P. 26-41.
10. Ashburner J. A fast diffeomorphic image registration algorithm //Neuroimage, 2007. V. 38. No. 1. P. 95-113.
11. Lowe D. G. Distinctive image features from scale-invariant keypoints // International journal of computer vision, 2004. V. 60. No. 2. P. 91-110.
12. Bay H. et al. Speeded-up robust features (SURF) //Computer vision and image understanding, 2008. V. 110. No. 3. P. 346-359.
13. Davis M.H. et al. A physics-based coordinate transformation for 3-D image matching // IEEE Transactions on Medical Imaging, 1997. V. 16. No. 3. P. 317-328.
14. Ашкеназы В.О. Сплайн-поверхности: Основы теории и вычислительные алгоритмы: Учебное пособие. Тверь: Тверской гос. ун-т, 2003.
15. Ibanez L. et al. The ITK software guide. Third Edition, 2013.
16. 3D Slicer <http://www.slicer.org/>
17. Klein A. et al. Evaluation of 14 nonlinear deformation algorithms applied to human brain MRI registration //Neuroimage, 2009. V. 46. No. 3. P. 786-802.
18. The Internet Brain Segmentation Repository (IBSR) <http://www.nitrc.org/projects/ibsr>

Б.В. КРЫЖАНОВСКИЙ, Л.Б. ЛИТИНСКИЙ

Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва

ОБЩИЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Развивается новый метод вычисления статистической суммы, которая играет центральную роль при исследовании сложных физических систем методами статистической физики. Наш подход основан на декомпозиции всего множества состояний на непересекающиеся классы и аппроксимации распределения энергий состояний из каждого класса гауссовой плотностью. Среднюю энергию и дисперсию распределения энергий состояний из данного класса удастся вычислить точно. Полученные общие выражения тестируются в применении к модели Изинга на гиперкубе.

Ключевые слова: *статистическая сумма, модель Изинга, машинное зрение.*

B.V. KRYZHANOVSKIY, L.B. LITINSKIY

Scientific Research Institute for System Analysis, Moscow

GENERAL METHOD FOR CALCULATION OF PARTITION FUNCTION

We develop a new method for calculation of partition sum that plays a central role when analyzing complex physical systems by means of statistical physics methods. Our method is based on decomposition of all the set of states into non-overlapping classes. Then we approximate the distribution of energies of the states from each class with the aid of the Gaussian density. We succeeded in exact calculation of the mean energy and the variance of the distribution of energies of the states from each class. The obtained general expressions were tested by the example of the Ising model on the hypercube.

Keywords: *partition sum, the Ising model, computer vision.*

Введение

Будем изучать систему из N взаимодействующих спинов $s_i = \{\pm 1\}$, $i = 1, \dots, N$. Состояние системы задается конфигурационным вектором

$\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_N)$ и энергией $E(\mathbf{s}) = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} s_i s_j$. Симметричная матрица $\mathbf{J} = (J_{ij})$ имеет нулевую диагональ: $J_{ii} = 0$.

Решение многих задач из различных областей знания определяется такими характеристиками, как степень изрезанности энергетической поверхности, распределение минимумов энергии, глубина глобального минимума и пр. Большой интерес представляет также зависимость этих характеристик от внешних параметров задачи. Опыт показывает, что для всякой сложной системы характерно наличие критических значений внешних параметров, при которых происходит кардинальная перестройка системы как целого. Этот круг вопросов изучается методами статистической физики. Центральная роль отводится при этом вычислению статистической суммы (*статсуммы*):

$$Z_N = \sum_{\mathbf{s}} \exp[-\beta E(\mathbf{s})],$$

здесь $\beta = 1/T$ – обратная температура (T характеризует меру случайности в поведении объектов), а суммирование ведется по всем 2^N состояниям $\mathbf{s}$ спиновой системы. Через статсумму и ее производные выражаются все наблюдаемые макро-характеристики спиновой системы: свободная энергия, намагниченность и другие [3]. В последние годы вычисление статсумм оказалось востребованным также в моделях компьютерного зрения и задачах машинного обучения (см. [8] и приведенную там литературу).

Вычисление статсуммы, описание ее зависимости от внешних параметров задачи – трудная проблема, которую удалось решить только для нескольких типов матриц $\mathbf{J}$. Всякий раз при этом использовалась специфика конкретной матрицы. Мы развиваем новый метод вычисления статсуммы, в известном смысле не зависящий от конкретного вида матрицы $\mathbf{J}$. Обратной стороной универсальности нашего подхода является приближенный характер получающихся результатов. Кратко существо нашего подхода состоит в следующем.

Пусть $\mathbf{s}_0$ – некоторая начальная конфигурация. Иногда в качестве $\mathbf{s}_0$ удобно взять основное состояние спиновой системы – глобальный минимум по энергии.

Обозначим через Ω_n множество всех состояний $\mathbf{s}$, отличающихся от $\mathbf{s}_0$ противоположными значениями n спинов:

$$\Omega_n = \{\mathbf{s} : (\mathbf{s}, \mathbf{s}_0) = N - 2n\}, n = 0, 1, \dots, N.$$

Распределение энергий для C_N^n состояний из класса Ω_n в общем случае неизвестно. Однако можно получить точные выражения для среднего E_n и дисперсии σ_n^2 этого распределения (см. [1],[2]).

Далее, при больших значениях n и N распределение энергий состояний из класса Ω_n хорошо аппроксимируется гауссовым распределением со средним E_n и дисперсией σ_n^2 . Пределы, до которых это утверждение справедливо, обсуждаются в последнем разделе статьи. Здесь лишь укажем, что данное утверждение проверено нами экспериментально для матриц $\mathbf{J}$ нескольких типов и размерностей $N \sim 10^3 - 10^4$ при различных значениях n . По меньшей мере, на интервале $E_n - 3\sigma_n \leq E \leq E_n + 3\sigma_n$ эмпирическая и гауссова плотности распределения совпадают практически идеально. Вне этого интервала энергий плотности распределения отличаются друг от друга, однако можно надеяться, что отличия на хвостах распределения для нас не принципиальны.

В условиях нашего предположения суммирование по состояниям класса Ω_n можно заменить интегрированием по гауссовой плотности. Выражение для статсуммы принимает вид:

$$Z_N = \sum_{n=0}^N \sum_{\Omega_n} e^{-\beta E(\mathbf{s})} \approx \sum_{n=0}^N C_N^n \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \exp \left[- \left(\beta E + \frac{(E - E_n)^2}{2\sigma_n^2} \right) \right] \frac{dE}{\sqrt{2\pi}\sigma_n}. \quad (1)$$

В качестве границ интегрирования здесь взяты наименьшее и наибольшее значения энергии $E(\mathbf{s})$ для класса Ω_n .

Данный прием является ключевым для нашего подхода. С его помощью проблема вычисления статистической суммы сводится к интегрированию экспоненты с большим показателем N . Последняя задача решается стандартным методом седловой точки.

Основные соотношения

В [1], [2] получены точные выражения для E_n и σ_n^2 . Нам потребуются их асимптотические выражения $E_x = \lim_{N \rightarrow \infty} E_n$ и $\sigma_x^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_n^2$, где $x = \frac{n}{N} < 1$:

$$\begin{aligned} E_x &= E_0(1-2x)^2, \\ \sigma_x^2 &= \left(\sum_{i \neq j}^N J_{ij}^2 \right) 2x(1-x) \left[4x(1-x)(1-\varepsilon_0^2) + (1-2x)^2 2N(d_0 - \varepsilon_0^2) \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $E_0 = E(\mathbf{s}_0)$ – энергия в начальной точке $\mathbf{s}_0$, $\epsilon_0^2 = 4E_0^2 \left(N^2 \sum_{i \neq j}^N J_{ij}^2 \right)^{-1}$,
 $d_0 = \|\mathbf{J}\mathbf{s}_0\|^2 \left(N \sum_{i \neq j}^N J_{ij}^2 \right)^{-1}$.

Используем асимптотику Стирлинга для C_N^n и заменим в выражении (1) суммирование по n интегрированием по переменной $x = n / N$. Тогда получим:

$$Z_N \sim \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_0^1 e^{-N \cdot f(x)} dx, \quad (3)$$

$$f(x) = L(x) + \beta \tilde{E}_x - \frac{1}{2} \beta^2 \tilde{\sigma}_x^2 - \frac{1}{N} \ln \Phi(x),$$

где $L(x) = x \ln x + (1-x) \ln(1-x)$ – функция Шеннона, а тильда означает деление соответствующей величины на N : $\tilde{E}_x = E_x / N$, $\tilde{\sigma}_x^2 = \sigma_x^2 / N$.

Под знаком интеграла в выражении (3) опущены медленно меняющиеся функции, несущественные для метода седловой точки. Функция $\Phi(x)$ имеет вид

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{A_x}^{B_x} e^{-t^2/2} dt,$$

а пределы интегрирования равны:

$$B_x = \sqrt{N} \frac{\beta \tilde{\sigma}_x^2 + \tilde{E}_{\max} - \tilde{E}_x}{\tilde{\sigma}_x},$$

$$A_x = \sqrt{N} \frac{\beta \tilde{\sigma}_x^2 + \tilde{E}_{\min} - \tilde{E}_x}{\tilde{\sigma}_x}.$$

Вычислим B_x и A_x , а вместе с ними и функцию $\Phi(x)$.

Поскольку $\tilde{E}_{\max} - \tilde{E}_x > 0$, числитель в выражении для B_x всегда положителен, и когда $N \rightarrow \infty$, то верхний предел интегрирования стремится к бесконечности: $B_x \rightarrow +\infty$. В выражении для A_x числитель может быть как отрицателен, так и положителен. В первом случае при $N \rightarrow \infty$ нижний предел $A_x \rightarrow -\infty$; как следствие получаем, что в этом случае $\Phi(x) \rightarrow 1$. Если же числитель в A_x положителен, то при $N \rightarrow \infty$ имеем $A_x \rightarrow +\infty$, и тогда $\Phi(x) \sim \exp(-A_x^2 / 2)$. Подставляя эти выражения для $\Phi(x)$ в (3), получаем в самом общем виде:

$$f(x) = \begin{cases} f^{(1)}(x) = L(x) + \beta \tilde{E}_x - \frac{\beta^2 \tilde{\sigma}_x^2}{2}, & \beta \tilde{\sigma}_x^2 + \tilde{E}_{\min} - \tilde{E}_x < 0, \\ f^{(2)}(x) = L(x) + \beta \tilde{E}_{\min} + \frac{1}{2} \frac{(\tilde{E}_{\min} - \tilde{E}_x)^2}{\tilde{\sigma}_x^2}, & \beta \tilde{\sigma}_x^2 + \tilde{E}_{\min} - \tilde{E}_x > 0. \end{cases} \quad (4)$$

Мы получили универсальное выражение для функции $f(x)$, стоящей в показателе экспоненты подынтегрального выражения в (3). Влияние матрицы $\mathbf{J}$ и начальной конфигурации $\mathbf{s}_0$ учитывается через константы

$$\sum_{i \neq j}^N J_{ij}^2, \quad \varepsilon_0^2, \quad d_0, \quad \text{и} \quad E_{\min}.$$

Для вычисления интеграла (3) теперь необходимо отыскать глобальный минимум функции $f(x)$ (4) при каждом β :

$$f_{\min}(\beta) = \min_{x \in [0,1]} f(x, \beta).$$

Тогда статсумма (3) вычисляется как $Z_N \sim \exp(-N f_{\min}(\beta))$, а, скажем, свободная энергия на один спин есть $f(\beta) = f_{\min}(\beta) / \beta$.

Для некоторых типов матрицы $\mathbf{J}$ все вычисления удастся провести до конца, в частности – для матриц, отвечающих модели Изинга на D -мерном гиперкубе.

Модель Изинга на гиперкубе

Обозначим q среднее число матричных элементов в строке, отличных от нуля. Наш подход может быть обоснован, когда $q \gg 1$. Желательно, кроме того, чтобы матричные элементы были случайными числами. Матрица $\mathbf{J}$, отвечающая модели Изинга на гиперкубе, решительно не удовлетворяет этим требованиям: для изинговой матрицы на D -мерном гиперкубе число отличных от нуля элементов в каждой строке равно $q = 2D$. Иными словами, для $D = 1, 2$ и 3 число отличных от нуля матричных элементов при $N \rightarrow \infty$ пренебрежимо мало; кроме того, все они равны одной и той же константе J . Такая матрица плохо подходит для нашего метода. Тем не менее, для нее удастся получить осмысленные результаты.

Основным состоянием в модели Изинга является вектор $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)$ – выберем эту конфигурацию в качестве начальной: $\mathbf{s}_0 = \mathbf{e}$. Нетрудно видеть, что $\tilde{E}_0 = -qJ/2$, $\varepsilon_0^2 = q/N \rightarrow 0$, $d_0 - \varepsilon_0^2 = 0$ и $\tilde{\sigma}_x^2 = qJ^2 8(x(1-x))^2$.

Можно показать, что при таком выборе s_0 наименьшая энергия в каждом Ω_x -слое асимптотически стремится к $\tilde{E}_0$: $\lim_{N \rightarrow \infty} E_{\min}(x) = E_0$; формулы (4) при этом сильно упрощаются.

Далее, все функции в (4) симметричны относительно середины интервала $x \in [0, 1]$, поэтому будем изучать их поведение на интервале $[0, 1/2]$. Введем безразмерный параметр $\bar{\beta} = J\beta$ и запишем функцию $f(x)$ (4) для модели Изинга в окончательном виде:

$$f(x) = \begin{cases} f^{(1)}(x) = L(x) - \frac{q\bar{\beta}}{2} \left[(1-2x)^2 + 8\bar{\beta}(x(1-x))^2 \right], & x \in [0, x_{\bar{\beta}}]; \\ f^{(2)}(x) = L(x) - \frac{q}{2} \left(\bar{\beta} - \frac{1}{2} \right), & x \in [x_{\bar{\beta}}, 1/2]; \end{cases} \quad (5)$$

здесь $x_{\bar{\beta}} = 1/2$, когда $\bar{\beta} < 1$, и $x_{\bar{\beta}} = (1 - \sqrt{1 - 1/\bar{\beta}})/2$, когда $\bar{\beta} > 1$.

Для $\bar{\beta} < 1$ необходимо найти глобальный минимум функции $f^{(1)}(x)$ на всем интервале $x \in [0, 1/2]$. Для $\bar{\beta} > 1$ функция $f(x)$ является составной: на интервале $[0, x_{\bar{\beta}}]$ необходимо минимизировать функцию $f^{(1)}(x)$, на интервале $[x_{\bar{\beta}}, 1/2]$ – функцию $f^{(2)}(x)$, а в качестве глобального минимума взять самый глубокий минимум из двух. Оказывается, основные события разворачиваются при $\bar{\beta} < 1$, так что глобальный минимум определяется поведением функции $f^{(1)}(x)$.

Окончательный результат приведем сначала для случая $q > 16/3$, поскольку для таких значений q трансформации функции $f^{(1)}(x)$ при изменении параметра $\bar{\beta}$ происходят по одному и тому же сценарию. Пока $\bar{\beta}$ невелико, то единственным минимумом $f^{(1)}(x)$ является точка $x_0 = 1/2$, а $f_{\min}^{(1)}(\bar{\beta}) = -\ln 2 - q\bar{\beta}^2/4$. Кардинальная перестройка системы происходит, когда $\bar{\beta}$ достигает критического значения

$$\bar{\beta}_c = \frac{1 - \sqrt{1 - 4/q}}{2}. \quad (6)$$

Как только $\bar{\beta}$ превзойдет $\bar{\beta}_c$, точка $x_0 = 1/2$ превратится в точку максимума $f^{(1)}(x)$, а рядом с ней появится новая точка минимума функции

$f^{(1)}(x) : x_1(\bar{\beta})$. При $\bar{\beta} = \bar{\beta}_c$ в системе происходит фазовый переход второго рода.

Дальнейшее увеличение параметра $\bar{\beta}$ неуклонно смещает точку минимума в направлении нуля: $x_1(\bar{\beta}) \rightarrow 0$. Система стремится к основному состоянию $\mathbf{s}_0 = (1, 1, \dots, 1)$, намагниченность которого $m = 1 - 2x$ равна 1. Это согласуется с физическими представлениями, согласно которым при $T \rightarrow 0$ спиновая система стремится оказаться в основном состоянии.

Для трехмерной модели Изинга $q = 6$ и формула (6) дает значение $\bar{\beta}_c \approx 0.2113$, близкое к значению 0.2224, которое было получено в [4] интенсивным численным моделированием. Для четырехмерной модели Изинга $q = 8$ и имеем $\bar{\beta}_c \approx 0.146$, что еще меньше отличается от полученной в [5] оценки 0.149. Вообще, когда значение параметра q достаточно велико, то из (6) получаем, что $\bar{\beta}_c \approx 1/q$; это отвечает представлениям о том, что при больших размерностях D модель Изинга демонстрирует показатели, характерные для модели среднего поля [5], [6].

Теперь займемся областью $q < 16/3$. Для 2-мерной модели Изинга ($q = 4$) в описанном выше сценарии появляются некоторые отличия, о которых мы не имеем возможности здесь говорить. Критическое значение $\bar{\beta}_c$ определяется теперь не аналитическим выражением (6), а получается в результате решения трансцендентного уравнения, и равно $\bar{\beta}_c \approx 0.3912$. Это на 10 % отличается от известного точного значения $\bar{\beta}_c = 0.4407$ [3].

Наконец для 1-мерного Изинга наш подход не работает совсем: в этом случае при $\bar{\beta} \rightarrow \infty$ спиновая система даже не стремится к основному состоянию. Мы связываем данное расхождение с тем, что число отличных от нуля матричных элементов в строке в этом случае предельно мало: $q = 2$.

Обобщения метода

В нашу модель несложно включить и внешнее магнитное поле $\mathbf{H}$ [7]. Для однородного магнитного поля $\mathbf{H} = H\mathbf{e}$ в выражении (3) для функции $f(x)$ появится дополнительный член $-\beta H(1 - 2x)$. Вблизи критической точки $\bar{\beta}_c$ можно получить выражения для спонтанной намагниченности, теплоемкости и магнитной восприимчивости. Соответствующие критические показатели оказываются классическими: $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$.

Все рассмотрения предыдущего раздела без изменения переносятся на любую другую модель, у которой в каждой строке матрицы $\mathbf{J}$ только q элементов отличны от нуля (и равны друг другу). Основным состоянием и в этом случае будет конфигурация $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)$, и все построения предыдущего раздела остаются в силе. Это относится, в частности, к модели Изинга на решетке Бете [3], когда каждый спин связан с q ближайшими соседями. Выражение (6) находится в качественном согласии с точным выражением, для решетки Бете [3]. При $q \rightarrow \infty$ оба результата совпадают.

Наконец, последнее замечание. Когда для любого n мы имеем $\sigma_n \rightarrow 0$, выражение (1) принимает вид $Z_N = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{-\beta E_n}$, хорошо известный в теории среднего поля [3]. Из (2) видно, что дисперсия σ_x^2 обращается в ноль в том единственном случае, когда все недиагональные матричные элементы равны друг другу: $q = N - 1$, $J_{ij} \equiv J$ – это и есть определение модели среднего поля. В этом случае $\mathbf{s}_0 = (1, 1, \dots, 1)$, $d_0 - \varepsilon_0^2 = 0$ и $\varepsilon_0^2 = 1$. Все вычисления упрощаются, функция $f(x)$ перестает быть составной, и после несложных вычислений получаем классическое уравнение Брэгга-Вильямса [3]. Подчеркнем, что для всех других матриц $\mathbf{J}$ дисперсия $\sigma_x^2 \neq 0$, и тогда наш подход позволяет получить более разумные оценки, чем модель среднего поля.

Обсуждение

В основе нашего подхода лежит предположение о том, что распределение энергий для состояний из класса Ω_x хорошо описывается гауссовой плотностью со средним E_x и дисперсией σ_x^2 (2). Обоснованию этого положения мы планируем посвятить отдельную публикацию. С помощью Центральной предельной теоремы мы рассчитываем обосновать его для случайных матриц $\mathbf{J}$. Для матриц $\mathbf{J}$ изингового типа возникает более сложная комбинаторика.

Наша убежденность в справедливости предложенной аппроксимации основана на интенсивном компьютерном моделировании. Для различных типов матриц $\mathbf{J}$, для размерностей $N \sim 10^3 - 10^4$, при разных значениях $x = n/N$ и различном выборе начальной конфигурации $\mathbf{s}_0$, генерировали большое число $K \sim 10^7$ случайных конфигураций из класса Ω_x и строили гистограмму распределения энергий. Для того, чтобы эксперимент можно

было сравнивать со стандартным гауссовым распределением, экспериментальные энергии E_i подвергали трансформации:

$$E_i \rightarrow \frac{E_i - E_x}{\sigma_x}.$$

На рис. 1 результаты эксперимента изображаются точками, а стандартная гауссова плотность распределения – сплошной линией. Верхняя левая панель отвечает случайной матрице $\mathbf{J}$, элементы которой распределены по стандартному гауссову закону – в физике такая матрица отвечает модели Шеррингтона–Киркпатрика спинового стекла (SK-model).

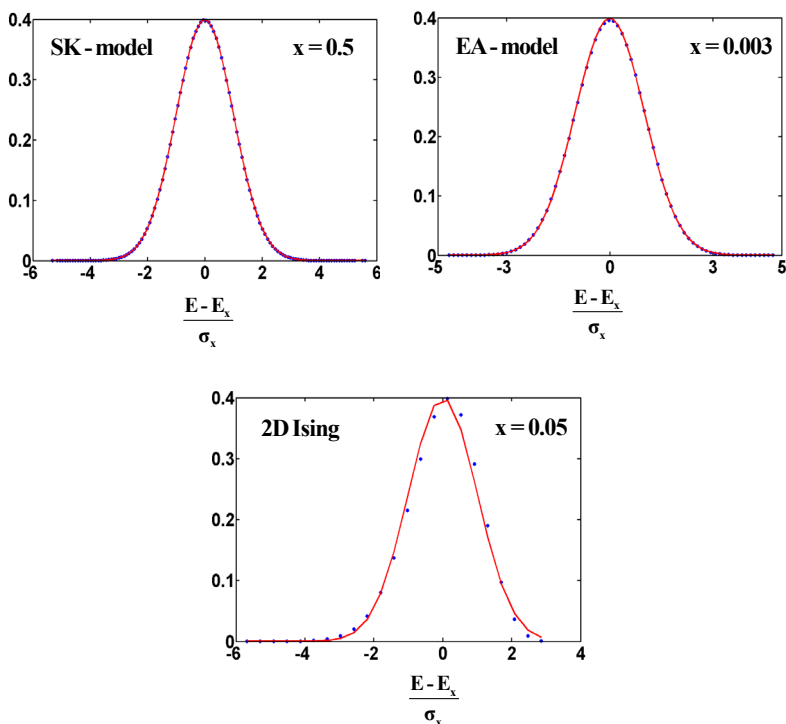


Рис. 1. Сопоставление экспериментальной плотности распределения энергий состояний из класса Ω_x (точки) и стандартного гауссова распределения (сплошная линия) для различных типов матрицы $\mathbf{J}$ (см. текст статьи)

Параметры эксперимента: $N = 1000$, $x = 0.5$, s_0 – случайная конфигурация. Верхняя правая панель отвечает случайной матрице, порожденной моделью Эдвардса–Андерсона спинового стекла (EA-model) с параметрами: $N = 900$, $x = 0.003$, s_0 – случайная конфигурация. Наконец нижняя панель отвечает 2-мерной модели Изинга (2D Ising) с параметрами: $N = 900$, $x = 0.05$, $s_0 = e$ – основное состояние.

Графики на верхних панелях демонстрируют замечательное согласие эксперимента с теорией для случайных матриц и случайной начальной конфигурации s_0 . Совпадение наблюдается как для больших значений параметра $x = 0.5$, так и для малых $x = 0.003$.

Если в качестве начальной конфигурации взять глубокий минимум по энергии, то для больших значений x все останется по-прежнему, а для малых значений x ($x < 0.05$), экспериментальная гистограмма будет отличаться от стандартного гауссова распределения. Наше основное предположение выполняется здесь плохо. С другой стороны, по мере стремления размерности N к бесконечности, область, в которой гауссова плотность расходится с экспериментальной плотностью, неуклонно уменьшается. Можно предположить, что при $N \rightarrow \infty$ эта область стягивается к 0.

Теперь охарактеризуем ситуацию с изинговыми матрицами. Для больших значений параметра x (скажем, для $x > 0.1$) и в этом случае наблюдается замечательное согласие эксперимента с теорией (не показано). Это относится к любому выбору начальной конфигурации s_0 . Для малых значений параметра x (скажем, для $x < 0.05$) экспериментальная кривая заметно отличается от гауссовой плотности. Типичная картина приведена на нижней панели рис. 1, когда в качестве начальной конфигурации выступает основное состояние: $s_0 = e$. Для меньших значений x различие между экспериментом и гауссовой плотностью становится еще больше (не показано).

Если в качестве s_0 здесь взять случайную конфигурацию, ситуация заметно улучшится (не показано). Однако и в этом случае экспериментальная кривая будет отличаться от стандартного гауссова распределения, и нет уверенности в том, что при $N \rightarrow \infty$ область, где аппроксимация гауссовой плотностью не работает, стягивается к 0. Возможно, именно по этой причине полученные в разделе 3 значения критических температур отличаются от значений, известных по литературе.

Работа выполнялась при финансовой поддержке программы Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 12-07-00295 и 13-01-00504).

Список литературы

1. Kryzhanovsky B.V., Kryzhanovsky V.M. The Shape of a Local Minimum and the Probability of its Detection in Random Search // Lecture Notes in Electrical Engineering, 2009. 24. P. 51-61.
2. Karandashev Ya.M., Kryzhanovsky B.V. Binary optimization: Efficient increasing of global minimum basin of attraction // Optical Memory & Neural Networks, 2010. 19. P. 110-125.
3. Бэкстер Р. Точно решаемые модели статистической физики. М.: Мир, 1985.
4. Blote H W J, Shchur L N, Talapov A L. The Cluster Processor: New Results // Int. J. Mod. Phys., 1999. C. 10 1137-1148.
5. Lundow P.H., Markstrom K. The critical behaviour of the Ising model on the 4-dimensional lattice // Preprint arXiv:1202.3031v1 (2012).
6. Aizenman M. Commun. Geometric analysis of ϕ_4 fields and Ising models. Parts I and II // Math. Phys., 1982. 86. P. 1-48.
7. Kryzhanovsky B., Litinskii L. *Proc. of 3rd International Conference Mathematical Modeling in Physical Sciences*, 2014, Madrid, (in print).
8. Novikov A. et al. Putting MRFs on a Tensor Train. // Proc. of 31th International Conf. of Machine Learning, Beijing, China. JMRL: W&CP, 2014. V. 32.

Стендовая сессия 3

Нейросетевые системы обработки данных, распознавания образов и управления

Н.А. ИВАНОВ, А.М. ВУЛЬФИН

Уфимский государственный авиационный технический университет
it.naivanov@gmail.com

АЛГОРИТМ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛИ ЯЗЫКА В СТАТИСТИЧЕСКОМ МАШИННОМ ПЕРЕВОДЧИКЕ

Рассматривается задача построения модели естественного языка для использования в составе статистического машинного переводчика. Исходными данными для построения модели является избыточная информация, извлекаемая из базы текстов на естественном языке. Предложен алгоритм построения модели языка на основе нейронной сети.

Ключевые слова: *нейронная сеть, статистический машинный переводчик, модель языка.*

N.A. IVANOV, A.M. VULFIN

Ufa State Aviation Technical University

A NEURAL NETWORK ALGORITHM FOR CONSTRUCTING THE LANGUAGE MODEL IN STATISTICAL MACHINE TRANSLATOR

The goal of this research is to construct a model of natural language for statistical machine translator. The initial data for the model is redundant information extracted from the corpus of natural language texts. The algorithm for the language model is based on neural network.

Keywords: *neural network, statistical machine translator, language model.*

Введение

Рассмотрим задачу построения статистического машинного переводчика на примере перевода с русского языка на английский. Формальная

модель статистического переводчика может быть сформулирована следующим образом [1]:

$$e = \arg \max_e P(e)P(r|e), \quad (1)$$

где r – исходная фраза на русском языке, e – искомая фраза на английском языке. Построение модели (1) разбивается на несколько этапов.

Первая задача – это вычисление вероятности $P(r|e)$ такой, что фраза r на одном языке является переводом фразы e с другого языка. Второй задачей является нахождение вероятности $P(e)$ использования фразы в языке. Третьей задачей является нахождение $\arg \max_e$.

Вследствие большой избыточности естественных языков полный перебор возможных вариантов построения искомой фразы является вычислительно невозможным, данная задача является NP-полной [1]. Следовательно, необходимы методы уменьшения области перебора вариантов.

Языковые модели влияют на выбор слов, варианты их расстановки и должны поощрять удачные варианты построения фразы и отбрасывать неудачные. К примеру, языковая модель английского языка должна поощрить фразу «the house is small», присвоив ей высокую вероятность, и присвоить низкую вероятность фразе «small the is house», отбросив её.

Простейшим вариантом построения языковой модели является сбор статистики встречаемости данного слова или фразы в корпусе [2]. В этом случае вероятность появления фразы e в тексте будет описываться формулой

$$P(e) = \frac{n}{N}, \quad (2)$$

где n показывает, сколько раз встретилась данная фраза в корпусе, а N – общее число фраз в корпусе.

Недостаток данного подхода связан с ограниченностью обучающих выборок, так как невозможно составить корпус текстов, охватывающий все возможные фразы в данном языке. Если искомая фраза не встретилась в обучающей выборке, то это не значит, что фраза не применима, тогда как при данном подходе ей будет присвоена нулевая вероятность использования. Для устранения этого недостатка применяются различные методы сглаживания вероятностей, такие как add-one smoothing, Good–Turing smoothing, Kneser–Ney smoothing и др.[1]

Традиционные статистические алгоритмы построения модели языка используют только данные о встречаемости данного слова или фразы в обучающей выборке, не используя никаких сведений и знаний о самом языке. В работе предлагается алгоритм построения модели языка на основе нейронной сети, использующий дополнительную информацию о сло-

вах и фразах исходной выборки. Такой информацией может быть часть речи, род, число, падеж слова или группы слов.

Постановка задачи и описание алгоритма

Нейросетевая модель языка должна принимать на вход вектор параметров, описывающий языковые признаки слов оцениваемой фразы. На выходе модель должна относить фразу к одному из классов оценок, характеризующих степень приемлемости фразы с точки зрения языка. Пример входных и выходных данных приведен в табл. 1.

Модель оценивает варианты расстановки слов в исходной фразе. На вход подаются части речи соответствующих слов фразы. На выходе выдаются оценки из множества «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно». Оценку «хорошо» фраза получает в случае, если данный порядок слов в ней грамматически верен и широко употребим. Оценка «удовлетворительно» дается фразе, у которой данный порядок слов грамматически верен, но не является широко употребимым. Оценка «неудовлетворительно» выдается фразе, в которой данный порядок слов грамматически запрещен и используется крайне редко. Можно отметить, что модели языков с жестко заданным порядком слов (английский, французский языки) чаще будут выдавать оценки вида «неудовлетворительно», тогда как модели языков со свободным порядком слов (русский язык) будут чаще выдавать оценку «удовлетворительно».

Таблица 1

Входные и выходные значения модели языка

Модель русского языка		
Исходная фраза	Вектор параметров	Оценка
я поднял книгу	«мест.» + «гл.» + «сущ.»	Хорошо
книгу поднял я	«сущ.» + «гл.» + «мест.»	Удовлетворительно
Модель английского языка		
the black car	«дет.» + «прил.» + «сущ.»	Хорошо
the car black	«дет.» + «сущ.» + «прил.»	Неудовлетворительно
Модель французского языка		
la voiture noir	«дет.» + «сущ.» + «прил.»	Хорошо
la noir voiture	«дет.» + «прил.» + «сущ.»	Неудовлетворительно

Данные о частях речи слов в изучаемой фразе предполагается извлекать с помощью сторонних парсеров и морфологических анализаторов текста. К примеру, для русского языка возможно использование программного продукта *Mystem*, разработанного компанией Яндекс.

Для построения нейросетевой модели русского языка был использован многослойный персептрон с $n \cdot k$ нейронами во входном слое, где n – число слов в исходной фразе, k – число входных признаков. Параметры нейронной сети и алгоритма обучения приведены в табл. 2 [3-4].

Таблица 2

Параметры архитектуры и алгоритма обучения нейронной сети

10^{-5}	Целевая ошибка на обучающем множестве
0.3	Коэффициент момента
1000	Максимальное количество итераций обучения
0.1	Скорость обучения
60	Количество нейронов во входном слое
32	Количество нейронов в скрытом слое
3	Количество нейронов в выходном слое
'tansig'; tansig'	Функции активации нейронов по слоям – гиперболический тангенс
'trainrp'	Алгоритм обучения Resilient Propagation
'mse'	Алгоритм формирования ошибки на обучающем множестве – среднеквадратичная ошибка

Входные признаки подаются на вход персептрона в том же порядке, в каком они находятся в исходной фразе в виде бинарного вектора. Множество входных признаков приведено в табл. 3. Для каждого слова строится бинарный вектор признаков: «1» – слово относится к соответствующей части речи, «-1» – не относится. Входной вектор нейронной сети образован последовательной склейкой $n = 5$ бинарных векторов. Выходной вектор состоит из трех элементов, отображающих соответствие входного образа одному из трех классов C_1, C_2, C_3 .

Обучающая выборка сформирована для трех оценок «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно» соответственно. Изначально построено полное множество входных комбинаций признаков.

Выборка для оценки «хорошо» формируется на основе корпуса текстов выбранного языка. Если конкретная фраза встречается в корпусе, то она будет занесена в обучающую выборку с ожидаемым выходом «Хорошо».

Множество входных признаков для слова «мама» русского языка

№	Часть речи	Кодовый признак
1	Имя существительное	1
2	Имя прилагательное	-1
3	Имя числительное	-1
4	Местоимение	-1
5	Глагол	-1
6	Наречие	-1
7	Предлог	-1
8	Союз	-1
9	Частица	-1
10	Междометие	-1
11	Причастие	-1
12	Деепричастие	-1

Выборка для оценки «неудовлетворительно» строится на основе знаний о выбранном языке. В частности, на основе грамматики языка. К примеру, на основе правила в грамматике французского языка «имя прилагательное» всегда стоит после имени существительного» можно построить множество запрещенных комбинаций пары «прил. + сущ.» с любыми иными частями речи.

Выборка для оценки «удовлетворительно» строится на основе грамматики языка. В языках со свободным порядком слов в предложении пусть и разрешены любые комбинации слов, однако есть ограниченное множество предпочтительных размещений. К примеру, в русском языке допустимы варианты «я поднял синюю книгу» и «я поднял книгу синюю», но первый вариант предпочтительнее.

Для проведения эксперимента была искусственно сформирована выборка из 248832 пар образцов, в которой 44056 комбинаций соответствуют оценке «Хорошо» (класс C_1), 161669 – оценке «Удовлетворительно» (класс C_2), 43107 – оценке «Неудовлетворительно» (класс C_3). Выборка была сгенерирована на основе составленных вручную грамматических правил русского языка. Изначально всему множеству образцов было поставлено в соответствие оценка «Удовлетворительно», так как русский язык является языком со свободным порядком слов и, вследствие этого,

большинство возможных комбинаций слов в данном языке являются допустимыми.

Далее, были забракованы оценкой «Неудовлетворительно» все фразы, в которых встречались явно неудачные комбинации частей речи. К примеру, были забракованы такие комбинации, как «причастие» + «деепричастие», «предлог» + «деепричастие» и т.д. Далее, чтобы выделить наиболее удачные варианты, всем удовлетворительным вариантам, в которых встречались хорошие комбинации, была присвоена оценка «Хорошо». Хорошими комбинации были признаны такие комбинации, как «имя прилагательное» + «имя существительное», «наречие» + «глагол» и т.п. Таким образом, были выделены наиболее предпочтительные комбинации частей речи. На практике, данные о хороших комбинациях предполагается получать на основе корпусов.

Целью первого эксперимента является проверка работоспособности построенной модели. Для этого эксперимента выборка была поделена в соотношении: 80% – обучающая выборка, 8% – тестовая выборка, 8% – экзаменационная выборка. При обучении использовалась процедура перекрестной проверки с 10 заходами. Результаты эксперимента приведены в табл. 4.

Таблица 4

Результаты классификации тестового множества

Суммарная квадратичная ошибка	0.00101832
Количество неверно распознанных образцов, шт.	8
Верно распознанных образцов, %	99,99

Результаты k -кратного скользящего контроля при $k = 10$ для разбиения исходной выборки на обучающую и тестовую приведены в табл. 5.

В результате проведения эксперимента подтверждена работоспособность построенной модели в условиях наличия информации о всех возможных входных комбинациях. В реальных же условиях эксплуатации модели наличие всей информации о входных комбинациях не гарантируется в силу ограниченности доступных текстовых корпусов. В целях проверки работоспособности модели в реальных условиях был проведен второй эксперимент, для которого выборка поделена в соотношении: 20 % – обучающая выборка, 8 % – тестовая выборка, 60 % – экзаменационная выборка. Результаты эксперимента приведены в табл. 6.

Таблица 5

Распределение классифицированных образцов

Распознанный класс , шт.	Актуальный класс, шт.			
		C ₁	C ₂	C ₃
	C ₁	34637 (99,95%)	0 (0%)	0 (0%)
	C ₂	5 (0,02%)	129963 (100%)	6 (0,02%)
	C ₃	9 (0,03%)	0 (0%)	35380 (99,98%)

Таблица 6

Результаты классификации тестового множества

Суммарная квадратичная ошибка	0.014
Количество неверно распознанных образцов, шт.	335
Верно распознанных образцов, %	99.78

Результаты k -кратного скользящего контроля при $k = 10$ для разбиения исходной выборки на обучающую и тестовую приведены в табл. 7.

Таблица 7

Распределение классифицированных образцов

Распознанный класс , шт.	Актуальный класс, шт.			
		C ₁	C ₂	C ₃
	C ₁	30854 (99,61%)	134 (0,11%)	48 (0,15 %)
	C ₂	80 (0,25%)	116197 (99,88%)	29 (0,09%)
	C ₃	44 (0,14%)	1 (0%)	31445 (99,76%)

В результате проведения эксперимента подтверждена работоспособность построенной модели в условиях отсутствия полной информации о входных комбинациях в силу ограниченности текстовых корпусов. При условном начальном разбиении исходного множества комбинаций на три класса согласно оценкам «Хорошо», «Удовлетворительно» и «Неудовлетворительно» точность отнесения комбинаций к классам является допустимой.

Выводы

Предложена модель языка на основе нейронной сети. Разработанная модель в сочетании со статистическими алгоритмами позволяет улучшить качество работы машинного переводчика для естественных языков. Алгоритм кодирования дополнительной информации о фразе не учитывает многие аспекты оценки фразы естественного языка и выдает достаточно приближенную оценку входных фразам.

Дальнейшие исследования направлены на увеличение количества признаков, учитываемых моделью языка, что позволит повысить качество перевода. Для повышения точности выдаваемой оценки необходимо расширение модели за счет использования статистики встречаемости фраз в текстовых корпусах.

Список литературы

1. Koehn P. Statistical machine translation. Cambridge University Press. 2010.
2. Bengio Y., Ducharme R., Vincent P., Jauvin C. A neural probabilistic language model // Journal of machine learning research, 2003. 3. P. 1137-1155.
3. Васильев В.И., Ильясов Б.Г. Интеллектуальные системы управления. Теория и практика: учебное пособие // Радиотехника, 2009. С. 33–62.
4. Барсегян А.А. Методы и модели анализа данных: OLAP и Data Mining. СПб.: БХВ-Пресс, 2004.

В.Н. БОНДАРЕВ

Севастопольский национальный технический университет
vbondarev00@mail.ru

ВЫДЕЛЕНИЕ ОКРАШЕННЫХ ГАУССОВЫХ СИГНАЛОВ С ПОМОЩЬЮ КАСКАДНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Рассматривается каскадная нейронная сеть, обеспечивающая последовательное выделение окрашенных гауссовых сигналов из их смеси с другими сигналами или шумами. Предложено правило обучения нейронной сети, основанное на критерии минимума среднего квадрата ошибки предсказания, упрощающее реализацию алгоритмов в реальном времени. Приводятся примеры выделенных сигналов и значения индексов эффективности.

Ключевые слова: *каскадная нейронная сеть, слепое разделение сигналов, выделение гауссовых сигналов.*

V.N. BONDAREV

Sevastopol National Technical University

COLORED GAUSSIAN SIGNAL EXTRACTION BASED ON CASCADE NEURAL NETWORK

Artificial neural network for consecutive colored Gaussian signal extraction from its mixture with other signals or noise is considered. It is proposed a cascade neural network learning rule based on criteria of minimum of mean square predictive error, which allows to make simpler the on-line realization of the network. Examples of extracted signals and values of performance indexes are demonstrated.

Keywords: *cascade neural network, blind signal separation, Gaussian signals extraction.*

Введение

Задача слепого выделения сигналов из смеси с другими сигналами или шумами весьма актуальна в области обработки биомедицинских сигналов, геофизических данных, обработки речи, анализе сигналов утечек трубопроводов и др. При этом выделение сигналов обычно осуществляют

на основе метода независимого компонентного анализа (НКА), который базируется на том, что исходные сигналы-источники статистически независимы и характеризуются распределением, отличным от распределения Гаусса [1, 2]. В работе [3] предложено правило обучения каскадной искусственной нейронной сети (ИНС) для слепого выделения сигналов, использующее критерий максимума абсолютного значения эксцесса выделяемого сигнала, т.е. повышающее его негауссовость.

Часто выделяемые сигналы являются статистически зависимыми или характеризуются значениями эксцесса, близкими к нулю (например, являются гауссовыми). В этом случае алгоритмы, основанные на принципах НКА, оказываются неэффективными [2].

Цель статьи состоит в разработке правила обучения каскадной ИНС в реальном времени для выделения окрашенных гауссовых сигналов, характеризующих заданной временной структурой.

Постановка задачи и вывод правила обучения

На рис. 1 изображена общая схема каскадной ИНС, предназначенная для последовательного выделения сигналов из смеси [2, 3]. Здесь $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_m]^T$ – наблюдаемый вектор, компоненты которого представляют собой аддитивную смесь ненаблюдаемых сигналов-источников $s_1, \dots, s_n$:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s},$$

где $\mathbf{A}_{m \times n}$ – неизвестная смешивающая матрица, $m \geq n$; $\mathbf{s} = [s_1, \dots, s_n]^T$ – вектор ненаблюдаемых сигналов-источников.

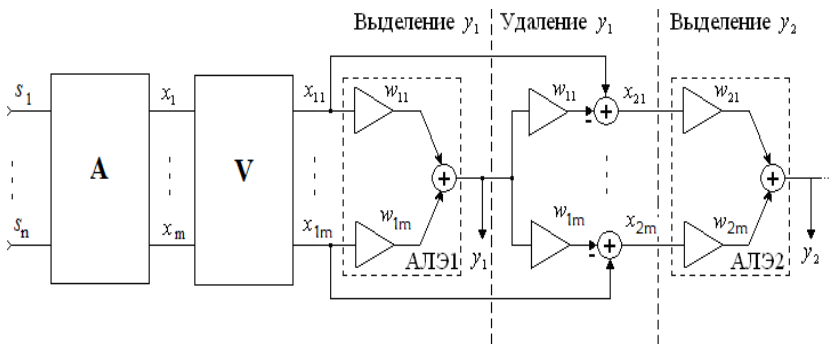


Рис. 1. Общая схема каскадной ИНС

Рассматриваемая структура сети обеспечивает поочередное выделение исходных сигналов-источников по методу НКА. Сеть функционирует в два этапа. На первом этапе вектор $\mathbf{x}$ преобразуется с помощью матрицы $\mathbf{V}$ к вектору $\mathbf{x}_1 = [x_{11}, \dots, x_{1m}]^T$, имеющему характеристики белого шума. На втором этапе с помощью ИНС, содержащей чередующиеся каскады выделения очередного сигнала и удаления его из смеси, формируются выходные сигналы $y_i(k)$, являющиеся оценками сигналов-источников $s_i(k)$. Выделение очередного сигнала $y_i(k)$ из смеси выполняется адаптивным линейным элементом (АЛЭ) за счет подстройки его весовых коэффициентов в соответствии с выбранным правилом обучения ИНС. При этом правило обучения выводится, исходя из предположения о том, что исходные сигналы являются статистически независимыми и негауссовыми. После выделения очередного сигнала он удаляется из смеси и далее процедура повторяется. Если исходные сигналы характеризуются нормальным распределением, то применение метода НКА практически невозможно. Чтобы выделять такие сигналы, используют дополнительные сведения об их временной структуре.

Предположим, что временная структура исходных сигналов-источников задаётся авторегрессионной (АР) моделью

$$s_i(k) = u_i(k) + \sum_{p=1}^P a_i(p)s_i(k-p), \quad (1)$$

где $s_i(k)$ – неизвестный i -й сигнал-источник, $i = 1, \dots, n$; $u_i(k)$ – белый шум с нормальным законом распределения; P – порядок модели; $a_i(p)$ – коэффициенты АР-модели, $p = 1, \dots, P$; k – целочисленный индекс, соответствующий номеру отсчета.

Для выделения таких сигналов необходимо, чтобы ИНС могла дополнительно восстанавливать параметры модели (1), т.е. контролировать временную структуру выделяемых сигналов. С этой целью в [2] предлагается последовательно АЛЭ включить фильтр линейного предсказания с передаточной функцией $B_1(z)$ (рис. 2). Адаптивно вычисляемые коэффициенты этого фильтра будут обеспечивать восстановление АР-модели (1) очередного выделяемого сигнала, в соответствии с которой

$$A_i(z) = \sum_{p=1}^P a_i(p)z^{-p},$$

где $A_i(z)$ – передаточная функция рекурсивной составляющей АР-модели.

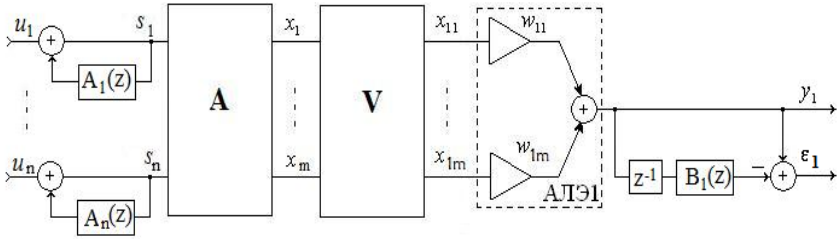


Рис. 2. Каскадная ИНС с линейным предсказателем

Взаимосвязь входа-выхода ИНС и фильтра линейного предсказания, изображенного на рис. 2, описывается формулами:

$$y_1(k) = \mathbf{w}_1^T \mathbf{x}_1(k), \quad (2)$$

$$\varepsilon_1(k) = y_1(k) - \sum_{p=1}^P b_1(p) y_1(k-p) = \mathbf{w}_1^T \mathbf{x}_1(k) - \mathbf{b}_1^T \bar{\mathbf{y}}_1, \quad (3)$$

где $\mathbf{w}_1 = [w_{11}, w_{12}, \dots, w_{1m}]^T$ – вектор коэффициентов АЛЭ1; $\varepsilon_1(k)$ – ошибка предсказания; $\mathbf{b}_1 = [b_1(1), b_1(2), \dots, b_1(P)]^T$ – вектор коэффициентов фильтра линейного предсказания с передаточной функцией $B_1(z) = \sum_{p=1}^P b_1(p) z^{-p}$;

$\bar{\mathbf{y}}_1 = [y_1(k-1), y_1(k-2), \dots, y_1(k-P)]^T$ – вектор предыдущих значений выделяемого сигнала $y_1(k)$.

Таким образом, очередной каскад ИНС имеет два выхода: $y_1(k)$, который представляет собой оценку выделяемого сигнала-источника, и $\varepsilon_1(k)$, соответствующий ошибке предсказания. Задача заключается в поиске значений векторов $\mathbf{w}_1$ и $\mathbf{b}_1$, обеспечивающих выделение очередного сигнала из смеси. ИНС успешно выделит на выходе первого каскада i -й сигнал-источник, если вектор весовых коэффициентов $\mathbf{w}_1$ удовлетворяет условию

$$\mathbf{w}_1^T \bar{\mathbf{A}}_1 = \mathbf{e}_i^T,$$

где $\bar{\mathbf{A}}_1 = \mathbf{V}\mathbf{A}$ и вектор $\mathbf{e}_i$ содержит только один ненулевой элемент в i -й строке. В этом случае $y_1(k) = \mathbf{e}_i^T \mathbf{s} = c_i s_i(k)$, где c_i – произвольный ненулевой масштабный множитель.

Для достижения указанной цели осуществляется минимизация функции стоимости [2]

$$J(\mathbf{w}_1, \mathbf{b}_1) = \frac{1}{2} E\{\epsilon_1^2\} + \frac{\beta}{4} (1 - E\{y_1^2\})^2, \quad (4)$$

где $\beta > 0$ – коэффициент штрафа. Первый член функции стоимости обеспечивает поиск минимума среднего квадрата ошибки предсказания $E\{\epsilon_1^2\}$. В соответствии с (1) ошибка предсказания будет иметь минимальные значения $\epsilon_1(k) = c_1 u_i(k)$, когда $y_1(k) = c_1 s_i(k)$. Таким образом, минимизируя средний квадрат ошибки предсказания, мы добиваемся того, чтобы на выходе ИНС выделялся один из исходных сигналов. Второй член функции стоимости исключает тривиальный случай $y_1(k) = 0$ и ограничивает дисперсию выхода $y_1(k)$ единичным значением.

Минимизация функция стоимости (4) позволяет получить следующее правило обучения [2]:

$$\mathbf{w}_1(k+1) = \mathbf{w}_1(k) - \eta_1(k) [\epsilon_1(k) \tilde{\mathbf{x}}_1(k) - \gamma(k) y_1(k) \mathbf{x}_1(k)], \quad (5)$$

$$\mathbf{b}_1(k+1) = \mathbf{b}_1(k) + \tilde{\eta}_1(k) \epsilon_1(k) \bar{\mathbf{y}}_1, \quad (6)$$

где $\gamma(k) = \beta[1 - m_2(y_1(k))]$ – коэффициент забывания; $m_2(y_1(k))$ – оценка второго момента выделяемого сигнала $y_1(k)$; $\tilde{\mathbf{x}}_1(k) = \mathbf{x}_1(k) - \sum_{p=1}^P b_1(p) \mathbf{x}_1(k-p)$ – вектор ошибок предсказания модифицированного вектора смеси $\mathbf{x}_1$; $\eta_1(k)$ и $\tilde{\eta}_1(k)$ – коэффициенты скорости обучения.

Практическое применение правила (5) предполагает значительные вычислительные затраты, обусловленные необходимостью m -кратного вычисления свертки $\sum_{p=1}^P b_1(p) \mathbf{x}_1(k-p)$. Это усложняет алгоритм обучения и затрудняет его реализацию в реальном времени. Кроме этого, требуется вычислять оценку $m_2(y_1)$ непосредственно в процессе выделения сигнала y_1 , что приводит к неустойчивости в работе ИНС.

С целью упрощения правила обучения воспользуемся более простым критерием минимума среднего квадрата ошибки предсказания

$$J(\mathbf{w}_1, \mathbf{b}_1) = \frac{1}{2} E\{\epsilon_1^2\} \text{ при } \|\mathbf{w}_1\| = 1. \quad (7)$$

Для поиска оптимальных значений $\mathbf{w}_1$ в условиях простого ограничения $\|\mathbf{w}_1\| = 1$ будем использовать проекционный подход, в соответствии с которым на каждой итерации выполняется поиск оптимального вектора весов $\mathbf{w}_1$ без учета ограничений, например, с помощью метода нисходящего градиента, а затем осуществляется нормализация вектора $\mathbf{w}_1$ по отношению к его длине.

Применяя стандартный подход нисходящего градиента к минимизации (7) с учетом (2) и (3), получаем

$$\frac{d\mathbf{w}_1}{dt} = -\eta_l(t) \frac{\partial J(\mathbf{w}_1, \mathbf{b}_1)}{\partial \mathbf{w}_1} = -\eta_l(t) E\{\varepsilon_1(t) \mathbf{x}_1(t)\}, \quad (8)$$

$$\frac{d\mathbf{b}_1}{dt} = -\tilde{\eta}_l(t) \frac{\partial J(\mathbf{w}_1, \mathbf{b}_1)}{\partial \mathbf{b}_1} = -\tilde{\eta}_l(t) E\{\varepsilon_1(t) \bar{\mathbf{y}}_1(t)\}, \quad (9)$$

где t – время; E – символ математического ожидания.

Отсюда с помощью стохастической аппроксимации и дискретизации выражений (8) и (9) получим следующее простое правило обучения

$$\mathbf{w}_1^+(k+1) = \mathbf{w}_1(k) - \eta_l(k) \varepsilon_1(k) \mathbf{x}_1(k), \quad (10)$$

$$\mathbf{b}_1(k+1) = \mathbf{b}_1(k) + \tilde{\eta}_l(k) \varepsilon_1(k) \bar{\mathbf{y}}_1(k), \quad (11)$$

где

$$\mathbf{w}_1(k+1) = \mathbf{w}_1^+(k+1) / \|\mathbf{w}_1^+(k+1)\|.$$

Заметим, что формулы (6) и (11) совпадают, а формула (10) значительно проще формулы (5), так как не использует текущих оценок момента второго порядка и не требует m -кратного вычисления свертки.

В соответствии с рис. 1 после выделения сигнала y_1 его удаляют из смеси $\mathbf{x}_1$, используя простое соотношение [2, 4]

$$\mathbf{x}_2(k) = \mathbf{x}_1(k) - \mathbf{w}_1 y_1(k).$$

Выделение и удаление последующих сигналов из $\mathbf{x}_2$ выполняется аналогично.

Результаты моделирования

Ниже приведены результаты компьютерного моделирования каскадной ИНС, использующей предложенное правило обучения (10)–(11), в сопоставлении с ИНС, использующей правило обучения (5)–(6). При этом в качестве исходных использовались два окрашенных гауссовых сигнала s_1 и s_2 , каждый из которых получался в результате фильтрации случайной

гауссовой последовательности нерекурсивным фильтром 20-го порядка. Коэффициенты фильтра выбирались случайно из диапазона $[-1, 1]$. Нормализованные значения эксцессов сигналов s_1 и s_2 были близки к нулю ($-0,0065$ и $-0,0176$, соответственно). Сигналы s_1 и s_2 смешивались с помощью матрицы $\mathbf{A}$, строки которой имели значения $[0,82 \text{ } -0,90]$ и $[-0,54 \text{ } -0,84]$. Начальные значения весов АЛЭ и коэффициентов фильтра предсказания задавались случайными числами в диапазоне от $-0,1$ до $0,1$. Порядок предсказывающего фильтра ИНС $P = 5$. Коэффициенты скорости обучения $\eta_1(k)$ и $\tilde{\eta}_1(k)$ были равны $0,001$. Коэффициент $\beta = 4$. Вычисление выбеливающей матрицы $\mathbf{V}$ осуществлялось рекурсивно по формуле [1, 2]

$$\mathbf{V}(k+1) = \mathbf{V}(k) - \mu(k)[\mathbf{v}(k)\mathbf{v}^T(k) - \mathbf{I}]\mathbf{V}(k),$$

где $\mu(k)$ — коэффициент, определяющий скорость адаптации; $\mathbf{I}$ — единичная матрица.

На рис. 3 изображены графики исходных колебаний s_1 и s_2 , графики, представляющие вектор смеси $\mathbf{x} = [x_1, x_2]$, и графики выделенных сигналов y_1 и y_2 . Визуальное сравнение выделенных сигналов показывает, что предложенное правило обучения сети обеспечивает успешное решение задачи. При этом $y_1 \approx c_1 s_2$ и $y_2 \approx c_2 s_1$, где c_1 и c_2 — масштабные множители.

Для количественной оценки полученных результатов можно воспользоваться индексом эффективности выделения сигналов на выходе j -го каскада ИНС [4]

$$PI_j = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \frac{e_{ji}^2}{e_{ji*}^2} - 1 \right),$$

где $\mathbf{e}_j = [e_{j1}, e_{j2}, \dots, e_{jn}]$, $e_{ji*} = \max\{|e_{ji}|\}$, $i = 1, \dots, n$. При этом для каждого каскада ИНС $\bar{\mathbf{A}}_j = (\mathbf{I} - \mathbf{w}_{j-1}\mathbf{w}_{j-1}^T)\bar{\mathbf{A}}_{j-1}$.

Чем меньше значение этого индекса, тем ближе выделенный сигнал на выходе соответствующего каскада ИНС к одному из исходных сигналов. Значения индексов эффективности для рассматриваемого примера сведены в табл. 1. Из таблицы следует, что индекс PI_1 для предложенного правила (10)–(11) сопоставим по значению с соответствующим индексом для правила (5)–(6), а значение индекса PI_2 оказалось существенно меньше. При этом правило (10)–(11) значительно проще правила (5)–(6).

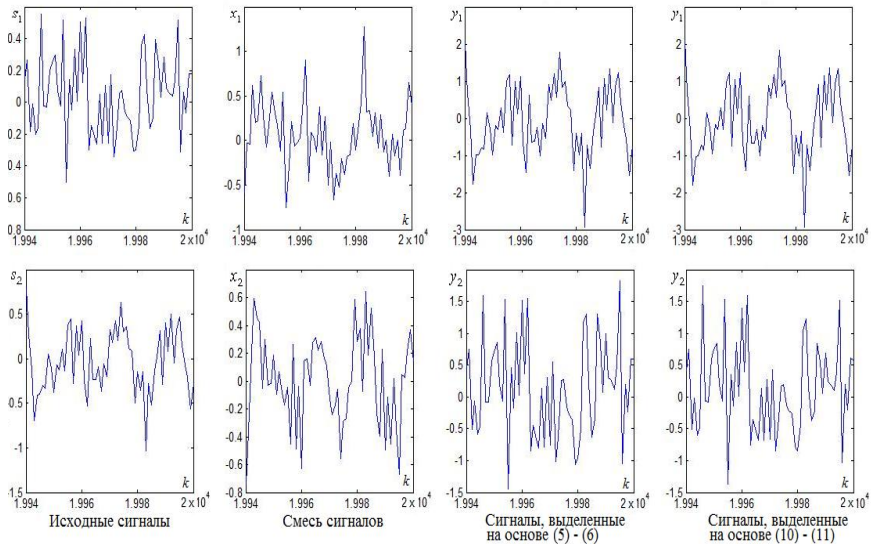


Рис. 3. Графики сигналов ИНС

Таблица 1

Значения индексов эффективности

Правило обучения	Индекс эффективности	
	PI_1	PI_2
(5) – (6)	0,000416	0,000496
(10) – (11)	0,000247	0,000019

Выводы

Таким образом, правило (10)–(11) может успешно использоваться для обучения каскадной ИНС при выделении гауссовых сигналов, временная структура которых задаётся АР-моделью. Применение этого правила позволяет существенно упростить реализацию каскадной ИНС, что весьма важно для работы в реальном времени. Также проведенные многочисленные эксперименты показали, что в ряде случаев правило (5)–(6) дает неустойчивые результаты, что выражается в выделении одного и того же сигнала на выходе каждого из каскадов ИНС.

Так как реальные сигналы в ходе их передачи от источников сигналов к первичным измерительным преобразователям подвергаются свертке с импульсными характеристиками каналов передачи, то *задачей дальнейших исследований* можно считать выделение окрашенных гауссовых сигналов с учетом динамических свойств указанных каналов.

Список литературы

1. Hyvarinen A., Karhunen J., Oja E. Independent component analysis. NY: John Wiley & Sons Inc., 2001.
2. Cichocki A., Amari S. Adaptive blind signal and image processing. NY: John Wiley & Sons Inc., 2002.
3. Бондарева О.В., Бондарев В.Н., Чернега В.С. Каскадная нейронная сеть для выделения акустического сигнала утечки водопровода // Вестник СевГТУ. Сборник научных трудов. Севастополь: СевГТУ, 2008. Вып. 93. С. 53–56.
4. Thawonmas R., Cichocki A., Amari S. A cascade neural network for blind signal extraction without spurious equilibria // IEICE Trans. on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences, 1998. V. E81–A. № 9. P. 1833–1846.

А.С. БЕКИРЕВ¹, В.В. КЛИМОВ¹, М.В. КУЗИН², Б.А. ЩУКИН¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

²BPC Banking Technologies, Moscow
abekirev.mephi@gmail.com

ВЫЯВЛЕНИЕ МОШЕННИЧЕСКИХ ТРАНЗАКЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОСТРОЕНИЯ КОМИТЕТОВ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И КЛАСТЕРИЗАЦИИ

Рассматривается задача выявления мошеннических банковских транзакций с использованием банковских карт на основе профильной информации. Рассмотрен подход применения комитета нейронных сетей и подход применения предварительной кластеризации. Произведено сравнение двух вышеуказанных подходов.

Ключевые слова: *комитет нейронных сетей, кластеризация, кардинг, мошеннические транзакции.*

**A.S. BEKIREV¹, V.V. KLIMOV¹, M.V. KUZIN²,
B.A. SHCHUKIN¹**

¹National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow

²BPC Banking Technologies, Moscow

CREDIT CARD FRAUD DETECTION USING NEURAL NETWORK COMMITTEE AND CLUSTERING

The task of credit card fraud detection using account information is considered. We apply two approaches to neural networks interaction: neural network committee and approach based on pre-clustering. Finally, these two methods are compared.

Keywords: *neural network committee, clustering, credit card fraud, fraud detection.*

Введение

На сегодняшний день все больше людей используют банковские карты для безналичной оплаты товаров и услуг. Как и в большинстве сфер деятельности, касающихся финансов, банковские организации сталкиваются с мошенничеством при работе с картами.

Как правило, мошеннические транзакции – редкое явление в общей массе всех транзакций, а их выявление – трудоемкий процесс для аналитиков и экспертов по безопасности.

На данный момент распространены следующие модели выявления мошеннических транзакций: системы правил, нейронные сети, сети Байеса [1, 2, 3].

Постановка задачи

Выявление мошенничества в области банковских карт может осуществляться анализом параметров отдельной транзакции или параметров последовательности транзакций. Задача выявления мошеннических транзакций представляет собой задачу классификации транзакций на два класса: класс легальных транзакций и класс мошеннических транзакций. В дальнейшем класс легальных транзакций будем обозначать Ω_{legal} , а класс мошеннических – Ω_{fraud} .

Пусть X – множество всех возможных значений параметров. $Y = \{0, 1\}$ – множество наименований классов. Можно говорить, что суще-

существует неизвестное отображение-зависимость $v: X \rightarrow Y$, причем значения этой зависимости известны только на объектах конечной обучающей выборке $T = \{(x_k, y_k)\}$, где

$$y_k = \begin{cases} 0, & x_k \in \Omega_{legal}, \\ 1, & x_k \in \Omega_{fraud}. \end{cases} \quad (1)$$

Требуется найти алгоритм a , выполняющий классификацию элементов множества X на два класса, такой, чтобы выполнялся критерий оптимальности $Q(a)$.

В табл. 1 приведено описание “ROC” характеристики (“Receiver Operator Characteristics”) [4].

Таблица 1

Характеристика “ROC”

Результат классификации	Транзакция мошенническая	Транзакция легальная
Класс мошеннических транзакций	TP	FP
Класс легальных транзакций	FN	TN

В данной таблице:

- TP (“True Positive”) – количество мошеннических транзакций, классифицированных алгоритмом a как мошеннические транзакции;
- FN (“False Negative”) – количество мошеннических транзакций, классифицированных алгоритмом a как легальные транзакции;
- FP (“False Positive”) – количество легальных транзакций, классифицированных алгоритмом a как мошеннические транзакции;
- TN (“True Negative”) – количество легальных транзакций, классифицированных алгоритмом a как легальные транзакции.

Введем в рассмотрение следующие соотношения [5, 6]:

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}, \quad (2)$$

$$TNR = \frac{TN}{TN + FP}. \quad (3)$$

В данных соотношениях:

- сумма $TP + FN$ – количество мошеннических транзакций;
- сумма $TN + FP$ – количество легальных транзакций;
- TPR (“True Positive Rate”) – доля истинно-положительных примеров (корректно выявленных мошеннических транзакций);

- TNR (“True Negative Rate”) – для истинно-отрицательных примеров (корректно выявленных легальных транзакций).

Зачастую проверка качества классификации алгоритма выполняется на какой-либо тестирующей выборке. Рассмотрим критерий оптимальности $Q(a) = \max_a (TPR + TNR)$, где значения TPR и TNR рассчитываются при

проверке качества классификации алгоритма a . Иными словами алгоритм a должен максимизировать целевую функцию $(TPR + TNR)$. Данный критерий позволяет избежать недостатка при использовании часто используемого критерия минимизации среднеквадратичной ошибки: так как количество мошеннических транзакций мало по сравнению с количеством легальных.

Использование профильной информации

В рамках исследования параметры транзакции были представлены в виде бинарного вектора информационных признаков, называемого моделью транзакции. Параметры транзакции задаются экспертом и могут меняться со временем, они могут включать информацию, получаемую путем анализа предыдущих транзакций по карте.

В данном случае информационные признаки транзакции включали в себя как информацию по текущей транзакции, так и информацию, полученную путем анализа предыдущих транзакций по карте.

К параметрам транзакции относятся:

- сумма, потраченная клиентом в текущий день, больше, чем в среднем за день;
- сумма транзакции больше 1000 у.е.;
- индикатор присутствия CVC2/CVV2;
- индикатор присутствия ПИН-кода;
- является ли банк-эмитент одновременно банком-эквайером и др.

Исходный набор данных, на котором проводились эксперименты, состоял из 3 728 713 транзакций, из которых 1 006 транзакций были помечены как мошеннические.

По каждой транзакции было определено 64 бинарных информационных признаков. В рамках выделенных информационных признаков множество моделей легальных транзакций пересекалось с множеством моделей мошеннических транзакций. Так как количество моделей мошеннических транзакций сравнительно мало относительно количества моделей легальных транзакций, то из множества моделей легальных транзакций были исключены все модели, входящие в данное пересечение.

В итоге была получена выборка, состоящая из 7210 моделей легальных транзакций и 581 моделей мошеннических транзакций. Из полученного множества было выбрано 80 % легальных и 80 % мошеннических транзакций для обучения, что составило 5768 моделей легальных транзакций и 464 модели мошеннических транзакций. Тестирование же в данном случае целесообразно проводить на выборке, содержащей 100 % моделей транзакций.

Архитектура нейросетевого комитета

Архитектура нейросетевого комитета показана на рис. 1. Функционирование комитета осуществляется следующим образом: входной вектор (“Input”) подается на вход n нейронным сетям $\{Neural\ Network\ i\}_{i=1}^n$. Далее из выходов данных нейронных сетей формируется входной вектор нейронной сети комитета (“Committee Network”), которая и формирует выход нейросетевого комитета (“Output”).

Процесс обучения нейросетевого комитета состоит из следующих шагов: каждая нейронная сеть $Neural\ Network\ i, i = \overline{1, n}$ обучается на всей обучающей выборке или на ее части, формируется обучающая выборка для сети комитета, на полученной выборке осуществляется обучение сети комитета.

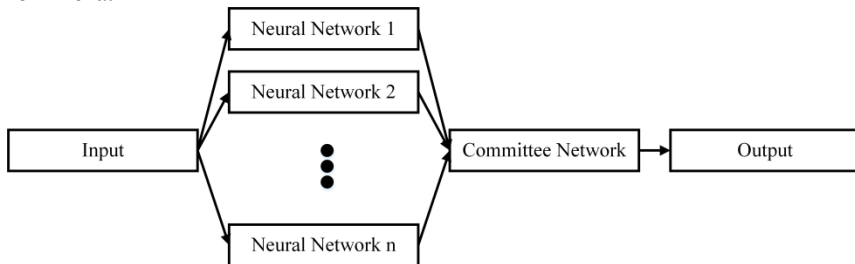


Рис. 1. Архитектура нейросетевого комитета

Использование комитета нейронных сетей

Для проведения экспериментов были выбраны две конкретные реализации данной архитектуры нейросетевого комитета: первый комитет, построенный на трех архитектурно идентичных входных сетях, и второй

комитет, построенный на четырех архитектурно различных сетях. В обоих случаях в качестве сетей *Neural Network* $i, i = 1, n$ используются многослойные персептроны с двумя скрытыми слоями, а в качестве нейронных сетей комитета – многослойный персептрон с одним скрытым слоем. Выход каждой нейронной сети лежит в пределах от 0 до 1. Архитектуры нейронных сетей представлены в табл. 2.

Таблица 2

Архитектуры нейронных сетей в нейросетевых комитетах

№ Комитета	Архитектура нейронной сети Neural Network i					Архитектура нейронной сети комитета Committee Network		
	Номер i нейронной сети	Количество нейронов в слоях				Количество нейронов в слоях		
		Слой 1	Слой 2	Слой 3	Слой 4	Слой 1	Слой 2	Слой 3
1	1	64	9	5	1	3	2	1
	2	64	9	5	1			
	3	64	9	5	1			
2	1	64	5	3	1	4	2	1
	2	64	7	4	1			
	3	64	8	6	1			
	4	64	10	5	1			

Классификация транзакции осуществляется следующим образом: пусть y – выход нейросетевого комитета, если $y < 0.5$, то транзакция классифицируется как легальная, а если $y \geq 0.5$, то – как мошенническая.

Обучение всех сетей проводилось методом обучения *resilient propagation*. Стоит отметить, что процесс обучения сопровождался трудоемким подбором подмножества обучающей выборки, такой, что после обучения тестирование показывало приемлемое распределение выходов нейросети на множестве легальных и мошеннических транзакций. Данные распределения представлены в табл. 3 и 4.

По данным результатов тестирования вычислены значения TPR, TNR и целевой функции для данных реализаций нейросетевых комитетов. Для первого комитета TPR = 0,6179, FNR = 0,7692, TPR + FNR = 1,3871, а для второго комитета TPR = 0,7625, FNR = 0,7625, TPR + FNR = 1,5345. Таким образом, можно утверждать, что второй комитет лучше выявляет как легальные, так и мошеннические транзакции.

Таблица 3

Результаты тестирования сетей первого нейросетевого комитета

Интервал	Количество выходов, попавших в определенный интервал, %							
	Мошеннические транзакции				Легальные транзакции			
	Сеть				Сеть			
	1	2	3	Сеть комитета	1	2	3	Сеть комитета
[0,0; 0,1)	28,57	0	23,75	38,21	61,12	0	52,25	76,70
[0,1; 0,2)	9,12	36,83	7,23	0	13,40	73,63	9,93	0,03
[0,2; 0,3)	0,34	1,38	2,07	0	1,33	2,25	5,64	0,10
[0,3; 0,4)	9,47	0	5,16	0	3,93	0,85	7,95	0,04
[0,4; 0,5)	52,50	0	61,79	0	20,22	0,21	24,23	0,06
[0,5; 0,6)	0	61,79	0	0	0	23,07	0	0,03
[0,6; 0,7)	0	0	0	0	0	0	0	23,05
[0,7; 0,8)	0	0	0	61,79	0	0	0	0
[0,8; 0,9)	0	0	0	0	0	0	0	0
[0,9; 1,0]	0	0	0	0	0	0	0	0

Таблица 4

Результаты тестирования сетей второго нейросетевого комитета

Интервал	Количество выходов, попавших в определенный интервал, %									
	Мошеннические транзакции					Легальные транзакции				
	Сеть					Сеть				
	1	2	3	4	Сеть комитета	1	2	3	4	Сеть комитета
[0,0; 0,1)	27,02	15,83	0	0	21,34	58,68	55,60	0	0	73,40
[0,1; 0,2)	11,53	4,82	21,51	28,92	1,55	17,63	13,04	73,91	73,73	1,78
[0,2; 0,3)	3,44	1,38	1,20	3,79	0,17	5,44	3,98	3,05	3,95	0,82
[0,3; 0,4)	4,99	24,27	1,55	2,75	0,17	3,54	10,42	1,61	2,50	0,64
[0,4; 0,5)	8,26	1,89	1,72	4,13	0,52	6,45	1,05	1,05	2,39	0,57
[0,5; 0,6)	44,75	1,20	0,52	4,82	1,20	8,27	1,17	1,10	2,32	0,75
[0,6; 0,7)	0	50,60	1,38	5,51	3,79	0	14,74	1,11	1,90	2,54
[0,7; 0,8)	0	0	3,10	7,40	71,26	0	0	1,35	3,47	19,51
[0,8; 0,9)	0	0	5,34	42,69	0	0	0	1,86	9,75	0
[0,9; 1,0]	0	0	63,68	0	0	0	0	14,97	0	0

Организация нейронных сетей с использованием кластеризации

Пусть существует кластеризатор, способный разбивать выборку по входным параметрам на n кластеров (классов). После кластеризации получается n обучающих выборок. Далее на основе i -й обучающей выборки строится алгоритм a_i , позволяющий выполнять требуемую задачу. В качестве алгоритмов могут использоваться нейронные сети, комитеты нейронных сетей, сети Байеса и др. А в качестве кластеризатора – статистические алгоритмы кластеризации, иерархическая кластеризация, нейронная сеть Кохонена и др.

На рис. 2 представлена система, состоящая из кластеризатора и n нейронных сетей. Входной вектор (“Input”) подается на вход кластеризатора (“Clusterer”) и переключателя (“Input Output Switcher”). Кластеризатор определяет, к какому кластеру принадлежит входной вектор (пусть k – m кластеру) и настраивает переключатель, который отправляет входной вектор на вход нейронной сети a_k (“Neural Network k ”), а выход нейронной сети a_k передает на выход системы (“Output”).

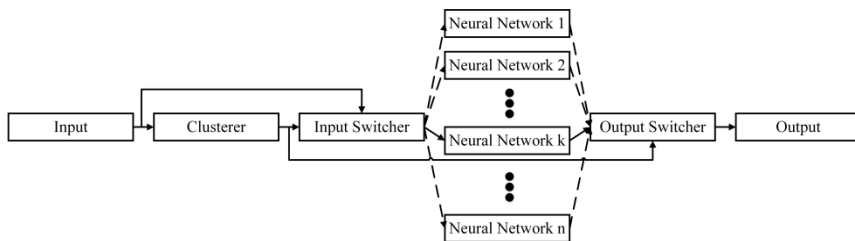


Рис. 2. Схема работы системы с использованием кластеризации

Выявление мошенничества с использованием кластеризации

В качестве кластеризатора использовалась нейронная сеть Кохонена. А в качестве алгоритмов выявления мошенничества – многослойные персептроны с двумя промежуточными слоями. Первый слой состоит из 64 нейронов, второй – из 9, третий – из 3, четвертый – из 1.

Была проведена кластеризация обучающей выборки на 2, 4 и 6 кластеров. Обучение сети Кохонена проводилось так, чтобы в одном кластере было не менее 5 % легальных транзакций и не менее 2 % мошеннических, чтобы исключить ситуацию, в которой в какой-либо кластер попадают

только мошеннические или только легальные транзакции. Далее на этих уже обученных сетях Кохонена, была подвергнута кластеризации тестирующая выборка. Результат кластеризации приведен в табл. 5.

Таблица 5

Результаты кластеризации обучающей и тестирующей выборок

Количество кластеров	Номер кластера	Количество транзакций, попавших в определенный кластер, %			
		Обучающая выборка		Тестирующая выборка	
		Мошеннические	Легальные	Мошеннические	Легальные
2	1	27,17	61,21	26,30	59,90
	2	72,83	38,79	75,09	40,10
4	1	4,99	11,21	4,88	10,15
	2	21,86	52,37	21,30	51,64
	3	56,14	26,94	56,70	28,40
	4	17,01	9,48	17,12	9,81
6	1	11,25	6,25	11,29	6,88
	2	16,45	39,66	16,13	37,87
	3	8,30	24,78	7,92	25,13
	4	10,64	3,88	10,75	4,13
	5	40,07	21,12	40,14	21,69
	6	13,28	4,31	13,77	4,30

Таблица 6

Результаты тестирования отдельных сетей

Количество кластеров	Номер кластера	<i>TPR</i>	<i>TNR</i>	<i>TPR + TNR</i>
2	1	0,948	0,687	1,635
	2	0,841	0,798	1,639
4	1	0,915	0,957	1,872
	2	0,853	0,780	1,633
	3	0,848	0,814	1,662
	4	0,895	0,981	1,876
6	1	0,980	0,832	1,812
	2	0,927	0,743	1,670
	3	0,897	0,793	1,690
	4	1,000	0,900	1,900
	5	0,913	0,761	1,674
	6	0,920	0,905	1,825

Нейронные сети были обучены на соответствующих выборках и протестированы. Результаты тестирования отдельных сетей представлены в табл. 6. Классификация транзакций выполнялась с использованием того же критерия, который был описан в разделе выявления мошенничества с использованием комитета нейронных сетей.

Таблица 7

Результаты тестирования всей системы

Количество кластеров	<i>TPR</i>	<i>TNR</i>	<i>TPR + TNR</i>
2	0,905	0,769	1,674
4	0,862	0,842	1,704
6	0,917	0,826	1,743

Обучение проводилось методом *resilient propagation*. Стоит отметить, что в процессе обучения отдельных сетей был применен следующий подход: формировалась новая обучающая выборка на основе обучающей выборки кластера, которая состояла из всех легальных транзакций обучающей выборки данного кластера и несколько раз дублированных мошеннических транзакций обучающей выборки данного кластера. Примененный подход позволяет увеличить влияние мошеннической составляющей обучающей выборки в процессе обучения. Для каждого кластера количество дублирований, при котором сеть показывала наилучший результат, различалось.

Далее была протестирована работа всей системы в целом при использовании 2, 4 и 6 кластеров (табл. 7). Наилучший результат показала система, состоящая из 6 кластеров.

Заключение

В результате проведенных исследований предложена математическая постановка задачи выявления мошеннических банковских транзакций. Описана архитектура нейросетевого комитета, используемого для выполнения данной задачи. Исследовано качество распознавания с использованием нейросетевого комитета. Предложен и реализован подход организации работы нейронных сетей с использованием кластеризации.

Предложенный подход показал свою эффективность. Как свидетельствуют проведенные эксперименты, он дал результаты лучше, чем подход с использованием нейросетевых комитетов.

Программа дальнейших исследований будет включать в себя использование генетических алгоритмов для обучения нейронных сетей, что позволит задавать функцию приспособленности нейронной сети, с помощью которой можно избежать чрезмерного влияния большого количества легальных транзакций в обучающей выборке [7].

Список литературы

1. Provost F., Fawcett T. Adaptive Fraud Detection // Data Mining and Knowledge Discovery, 1997. V. 1. P. 291–316.
2. Hepp M., Brause R., Langsdorf T. Neural Data Mining for Credit Card Fraud Detection // Proceedings of the 11th IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence. Washington, DC, USA: IEEE Computer Society, 1999. P. 103–106.
3. Maes S., Tuyls K., Vanschoenwinkel B., Manderick B. Credit Card Fraud Detection Using Bayesian and Neural Networks // First International NAISO congress on neuro fuzzy technologies. Havana, Cuba: NAISO Academic Press, 2002. P. 16–19.
4. Provost F., Fawcett T., Kohavi R. The Case Against Accuracy Estimation for Comparing Induction Algorithms // In Proceedings of the Fifteenth International Conference on Machine Learning. Morgan Kaufmann, 1997. P. 445–453.
5. Zweig M., Campbell G. ROC Plots: A Fundamental Evaluation Tool in Clinical Medicine // Clinical Chemistry, 1993. V. 39. № 4. P. 561–577.
6. Davis J., Goadrich M. The relationship between Precision-Recall and ROC curves // ICML'06: Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning. New York, NY, USA: ACM, 2006. P. 233–240.
7. Genetic Algorithms and Fuzzy Logic Systems: Soft Computing Perspectives, Ed. by E. Sanchez, S. Takanori, A. Lofti. River Edge, USA: World Scientific Publishing Co., Inc., 1997.

В.И. АНИКИН, А.А. КАРМАНОВА

Поволжский государственный университет сервиса, Тольятти
anikin_vi@mail.ru, turaeva.alexandra@gmail.com

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ КЛЕТОЧНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ КОХОНЕНА В ЭЛЕКТРОННЫХ ТАБЛИЦАХ

Смоделирована работа клеточной нейронной сети Кохонена в табличном процессоре Microsoft Excel. Исследованы физические закономерности и показана высокая временная эффективность кластеризации и классификации многомерных данных клеточной сетью. Предложены оригинальный метод начального разворачивания самоорганизующейся карты и полезное применение краевого эффекта и многосвязных самоорганизующихся карт для решения проблемы «мертвых» нейронов и надежного выделения границ кластеров.

Ключевые слова: *клеточный автомат, «мертвые» нейроны, краевой эффект, многосвязная самоорганизующаяся карта.*

V.I. ANIKIN, A.A. KARMANOVA

Volga Region State University of Service, Togliatti, Samara region

MODELING AND STUDY OF CELLULAR KOHONEN'S NEURAL NETWORK IN SPREADSHEETS

The work of Cellular Kohonen's Neural Network in Microsoft Excel was emulated. The physical features and high temporal efficiency of multidimensional data clustering and classification by the cellular network were studied. An original method for the initial deployment of a self-organizing maps, and useful application of the edge effect and multilinked self-organizing maps to solve the problem of "dead" neurons and reliable identification of cluster boundaries were proposed.

Keywords: *cellular automata, "dead" neurons, edge effect, multilinked self-organizing map, U- and P-matrixes, multi-layer clustering.*

Введение

Обучение искусственной нейронной сети (ИНС) Кохонена относится к типу самообучающегося соревнования и в классическом виде представлено алгоритмом WTA (Winner Takes All – «победитель забирает все») [1]. Неудобство использования классического алгоритма обучения объясняется наличием у него таких существенных недостатков, как большое количество параметров и продолжительное время обучения сети, проблема «мертвых» нейронов, увеличивающая погрешность квантования.

Существует много модификаций алгоритма WTA для решения проблем классического подхода к обучению сети Кохонена: алгоритм CWTA (Conscience Winner Takes All – «победитель справедливо получает все») [2], WTM (Winner Takes Most – «победитель получает больше») [2], TASOM – (Time Adaptive Self-Organizing Map (SOM) – «изменяющаяся во времени самоорганизующаяся карта») [3] и другие. Общим недостатком рассмотренных выше алгоритмов является наличие в них большого числа эвристических параметров и искусственность предлагаемых решений проблемы «мертвых» нейронов.

Настойчивые попытки избавиться от недостатков классического алгоритма обучения сети Кохонена привели нас к решению в виде клеточной нейронной сети [4]. Алгоритм обязан своему появлению вычислительной среде Excel, чьи встроенные табличные и графические средства визуализации позволяют пошагово моделировать весь процесс обучения сети Ко-

хонена. Это помогло «изнутри» увидеть физиологию работы алгоритма, понять его проблемы и провести ряд смелых экспериментов, не останавливая ход мысли техническими ограничениями.

Клеточная нейронная сеть Кохонена представляет собой обладающую высокой степенью самоорганизации модификацию стандартного алгоритма обучения. Обучение сети происходит в пакетном режиме с применением клеточного автомата, дискретного в пространстве и во времени, но непрерывного по состояниям [4, 5]. Такого рода непрерывные КА, введенные в употребление К. Канеко в 1984 г. [6], получили название решето связанных отображений. Для успешного обучения достаточно учитывать только локальные взаимодействия между соседними нейронами, то есть использовать клеточный автомат с радиусом окружения $r = 1$. Близкое сходство явлений самоорганизации, наблюдаемых в нейронной сети Кохонена и клеточных нейронных сетях (Cellular Neural Networks – CNN), отмечали и другие исследователи.

Целью работы является моделирование клеточной нейронной сети Кохонена в табличном процессоре Excel и исследование физических закономерностей кластеризации и классификации многомерных данных посредством реализованной табличной модели сети.

Постановка задачи исследования

Ячейкой клеточного автомата в алгоритме обучения сети является один нейрон слоя Кохонена, топологически связанный (например, окружением Мура или фон Неймана) с соседними нейронами двумерной самоорганизующейся карты Кохонена. Таким образом, клеточный автомат – это множество взаимодействующих со своими соседями нейронов слоя Кохонена, помещенных в непрерывное пространство обучающих образцов. Состояние ячейки задается многомерным вектором, компоненты которого суть координаты соответствующего нейрона в пространстве обучающих образцов. В соответствии с принципом «ближайшего соседа» нейроны сети являются центрами многомерных окрестностей Вороного, на которые, подобно мозаике, делится все пространство учебных образцов в итерациях обучения.

В алгоритме обучения клеточной сети использован нестандартный способ задания начального состояния нейронов сети [5], обеспечивающий адаптивное саморазворачивание нейронов с образованием упорядоченной самоорганизующейся карты Кохонена. Концептуально главная идея алгоритма саморазворачивания клеточной нейронной сети Кохонена – постепенное втягивание активными нейронами неактивных нейронов в норми-

рованный гиперкуб пространства учебных образцов. Для этого при инициализации сети все нейроны исходно помещаются в произвольную точку на гиперсфере достаточно большого радиуса $R > 3\sqrt{d}$, центр которой совпадает с центром пространства учебных образцов (которое нормировано и образует гиперкуб с длиной ребра, равной 2), где d – размерность гиперкуба пространства учебных образцов.

Радиус R выбирается таким образом, чтобы находящиеся на гиперсфере нейроны никогда не могли победить самостоятельно и «втягивались» бы в гиперкуб учебных образцов только благодаря своим связям с ранее победившими нейронами, а не за счет собственных побед. Для обеспечения процесса упорядоченного разворачивания к весам соседей нейрона-победителя добавляется небольшая вычисляемая мультипликативная поправка с масштабным коэффициентом $\alpha = 10^{-3} \dots 10^{-4}$. В первой эпохе обучения в качестве нейрона-победителя выбирается центральный нейрон самоорганизующейся карты SOM. Выбор плоскости, в которой происходит саморазворачивание сети, неоднозначен (всего имеется $d(d-1)/2$ таких плоскостей) и оказывает влияние на результат кластеризации данных методом SOM. Очевидно, что оптимальным, но не необходимым выбором является плоскость двух главных компонент.

Если нейронная сеть не является односвязной, то по одному нейрону из каждой несвязной области необходимо поместить внутрь гиперкуба учебных образцов, чтобы в первой эпохе обучения они могли самостоятельно победить; остальные нейроны помещаются в какую-либо точку на гиперсфере начальных состояний. Если этого не сделать, то после разворачивания сети активированными окажутся только нейроны связной области, к которой принадлежит нейрон 0.

Описанный в работе [5] механизм начальной инициализации ИНС Кохонена, обучаемой клеточным автоматом, устраняет плохую самоорганизацию сети как главный недостаток пакетных алгоритмов обучения, из-за которого такие алгоритмы используются редко.

Задачами исследования являются реализация авторского алгоритма обучения клеточной НС Кохонена табличными средствами Excel и проведение экспериментов по кластеризации и классификации данных различного объема, размерности и пространственного распределения.

Интерпретация и иллюстрация полученных результатов

Особенностью данной работы является то, что нейронная сеть Кохонена была реализована чисто табличными средствами в виде итерацион-

ной табличной модели Excel без программирования на языке VBA, что само по себе является нетривиальной задачей [7].

Табличная модель ИНС Кохонена реализована на пяти рабочих листах Excel: «Выборки», «Инициализация», «Обучение», «Кластеризация», «Визуализация». Рабочий лист «Выборки» содержит изучаемые многомерные выборки данных, нормированные к интервалу $[-1, 1]$ по каждой числовой координате, а также интерфейс активации используемой в данный момент выборки.

Рабочий лист «Инициализация» предназначен для задания начальной конфигурации клеточной НС Кохонена, позволяя пользователю определить геометрию сети и прямоугольной SOM, а также явно указать нейрон, который станет победителем в первой эпохе обучения. На этом же рабочем листе выполняются расчеты мультипликативных поправок к весам нейронов в эпохах саморазворачивания сети и вычисляются координаты случайной точки на гиперсфере начальной инициализации весов нейронов [5].

На рабочем листе «Обучение» табличными средствами реализован описанный в [4] оригинальный авторский алгоритм обучения клеточной НС Кохонена. Пользовательский интерфейс этого листа позволяет в визуальном режиме определять параметры обучения (число эпох саморазворачивания, взаимодействия, дообучения по алгоритму WTA), разрывать / активировать связи между нейронами, запускать / останавливать итерации обучения.

На рабочем листе «Кластеризация» реализован алгоритм выполнения одной эпохи подачи учебных образцов на входы обученной НС с целью их разделения на кластеры и вычисления элементов Р-матрицы. Правильность выделения кластеров подтверждается совпадением центра тяжести кластеров со средними значениями координат учебных образцов, их сформировавших.

Наконец, рабочий лист «Визуализация» содержит интерактивные средства визуализации результатов кластеризации. Используя встроенные в Excel формулы и средства условного форматирования, удастся эффективно визуализировать U-, H- и Р-матрицы, координатные С-карты, карты классов образцов (при обучении с учителем), а также интерактивно выполнять разнообразную пост-обработку полученных результатов. С помощью механизма сводных таблиц для каждого из кластеров вычисляются описательные статистики.

В общем случае обучение нейронной сети выполняется за две фазы:

- *фаза взаимодействия*, в которой связи между нейронами включены, и сеть обучается клеточным автоматом заданной структуры. В зависимо-

сти от начальных условий и структуры обучающего клеточного автомата в конце этой фазы наблюдается одна из двух устойчивых конфигураций нейронов сети – *eventually fixed* (предельная неподвижная) или *eventually periodic* (предельная периодическая). Для однозначности результата обучения сети наибольший интерес представляют конечные конфигурации *eventually fixed*, достичь которые удастся не всегда. В ряде случаев конечную конфигурацию *eventually fixed* удастся получить повторным обучением сети при других начальных условиях.

- фаза, в которой связи между нейронами отключаются, и сеть «до-обучается» по алгоритму WTA. Длительность второй фазы обучения сети Кохонена по алгоритму WTA выбирается такой, чтобы нейроны сети достигли своего стационарного состояния, которое всегда достижимо.

Действенность описанного алгоритма адаптивного саморазворачивания клеточной сети Кохонена продемонстрируем на примере моделируемой компьютером двумерной случайной выборки с круговой симметрией объемом 4000 элементов (рис. 1). Видно, что вновь активизируемые нейроны втягиваются в нормированное пространство учебных образцов латерально, без скручивания сети. Краевой эффект, обычно считающийся паразитным, теперь играет положительную роль, оставляя на периферии пространства учебных образцов свободное место для добавления следующих активизируемых нейронов.

Наличие в пространстве учебных образцов линейно- или нелинейно разделимых областей и появление обусловленных таким пространственным распределением «мертвых» нейронов приводит к тому, что в конце фазы взаимодействия наблюдаются конечные устойчивые конфигурации *eventually periodic*, избавиться от которых повторным обучением сети не удастся. Решением проблемы в такой ситуации становится выборочное управление индивидуальными связями между нейронами сети Кохонена, когда *односвязная SOM* модифицируется в *многосвязную*.

Сначала *односвязная SOM* обучается клеточным автоматом Мура, выполняются кластеризация элементов обучающей выборки и последующая группировка полученных кластеров с использованием УН- и Р-матриц. Затем, основываясь на полученных результатах группирования, *односвязная SOM* разрезается на несколько областей вдоль предполагаемых границ классов, и клеточная нейронная сеть Кохонена с полученной *многосвязной SOM* обучается вторично. После завершения процесса обучения снова выполняется кластеризация элементов обучающей выборки и группировка полученных кластеров (рис. 2).

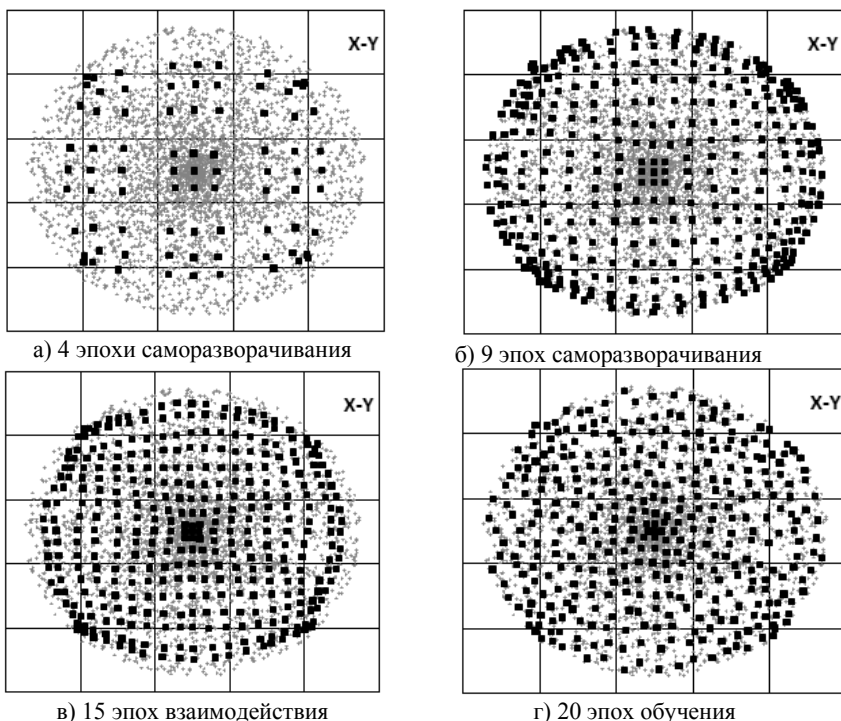
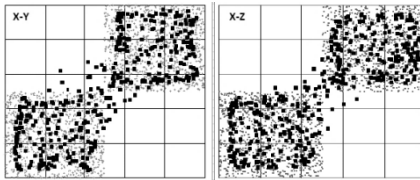


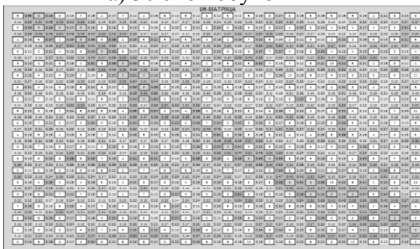
Рис. 1. Обучение нейронной сети Кохонена с прямоугольной SOM размером 19×19 нейронов: эпох саморазворачивания сети – 9, взаимодействия – 15, дообучения по алгоритму WTA – 5

Краевой эффект, с которым обычно борются путем задания периодических граничных условий на краях SOM, наблюдается и у границ пространственно разделимых классов образов.

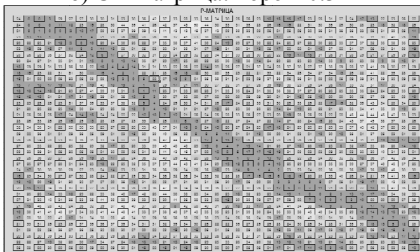
На самом деле этот эффект внутренне присущ самому методу SOM, и избавиться от него невозможно, пока существуют латеральные локальные связи между нейронами. Единственный корректный механизм борьбы с ним – это дообучение (после завершения эпох взаимодействия) нейронной сети Кохонена по алгоритму WTA.

Односвязная SOM

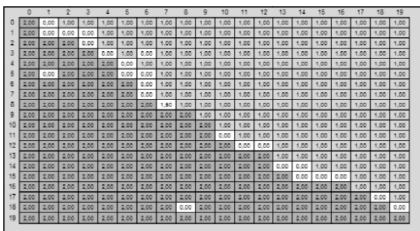
а) 30 эпох обучения



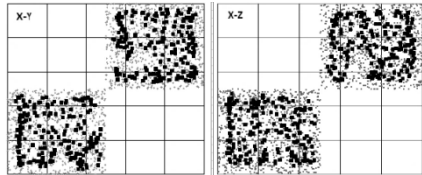
б) УН-матрица: порог=0.32



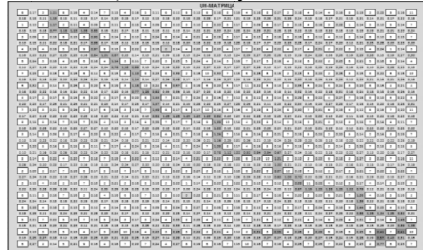
в) Р-матрица: R=0.2, порог=20



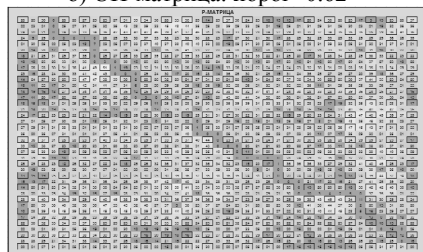
г) карта классов: 30 эпох обучения

Двухсвязная SOM

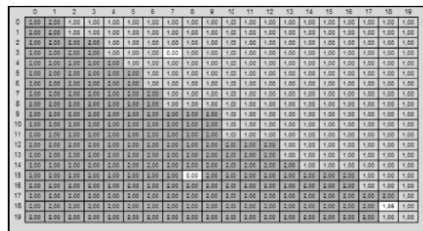
а) 30 эпох обучения



б) УН-матрица: порог=0.62



в) Р-матрица: R=0.2, порог=20



г) карта классов: 40 эпох обучения

Рис. 2. Результаты кластеризации элементов тестовой выборки данных со случайным распределением учебных образцов внутри двух соприкасающихся кубов после 40 эпох обучения

Из рис. 2 видно, что при использовании двухсвязной SOM связи между нейронами, принадлежащими разным классам, принудительно разрываются, и появление «мертвых» нейронов исключается (рис. 2, *а* справа). В случае многосвязной SOM улучшается разделение учебных образцов на классы посредством УН-матрицы, граница между классами становится четко определенной (рис. 2, *б* справа), повышается порог группирования, что равносильно увеличению расстояния между граничными элементами разных классов. Положительный эффект от использования многосвязной SOM в случае Р-матрицы менее заметен (рис. 2, *в*).

В случае, когда учебные образцы не являются пространственно разделимыми (линейно или нелинейно), технология кластеризации многомерных данных отличается от описанной выше. Действительно, одним из распространённых результатов кластеризации пространственно неразделимых данных является ситуация, когда большой процент наиболее интересных учебных образцов попадают в один кластер, что лишает кластеризацию практического смысла. Простое увеличение размерности используемой сети Кохонена приводит к дроблению уже обнаруженных стабильных кластеров на более мелкие и дальнейшему усложнению ситуации. Для решения этой проблемы используется *многослойная кластеризация*, когда в каждом новом слое для обучения сети используется усеченная выборка данных, не содержащая образцов, попавших в выделенные предыдущими слоями кластеры.

Для увеличения коррелированности образцов обучающей выборки данных можно применить метод линейного преобразования входных параметров. Заметим, что увеличение корреляции образцов результативно только для выборок данных, в которых присутствует определенная организованность. Таким образом, структура нейронной сети, применяемой для классификации многомерных данных, зависит от их пространственного распределения, поэтому в общем случае успешное практическое применение метода SOM предполагает наличие предварительных знаний об этом распределении.

Заключение

Проведенные экспериментальные исследования показали перспективность и высокую временную эффективность кластеризации и классификации многомерных выборок данных НС Кохонена, обучаемой клеточным автоматом. Исследования проводились с использованием разработанной авторами итерационной табличной модели ИНС Кохонена, реализованной в Excel чисто табличными средствами, без написания программного кода VBA.

Показано полезное применение краевого эффекта и многосвязных SOM для надежного выделения границ группирования кластеров в линейно и нелинейно делимых пространствах учебных образцов и для решения проблемы «мертвых» нейронов, расположенных вблизи этих границ. Изучены закономерности многослойной кластеризации многомерных выборок данных небольшого объема. Показано, что линейное преобразование координат обучающей выборки является важным методом подготовки данных к кластеризации с помощью ИНС Кохонена и их надлежащего статистического анализа.

Погруженность клеточной НС Кохонена в мощную вычислительную и аналитическую среду Excel является главным достоинством данного экспериментального исследования, открывая перед исследователем потрясающие возможности для креативного творчества и визуального экспериментирования с алгоритмом вычислений, входными, выходными и промежуточными данными. Незначительное увеличение времени обучения клеточной НС Кохонена, обусловленное низким быстродействием электронных таблиц, многократно окупается наглядностью, гибкостью анализа и эффективной визуализацией результатов кластеризации и классификации многомерных данных в Excel.

Список литературы

1. Кохонен Т. Самоорганизующиеся карты. / Пер. с англ. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. С. 159-337.
2. Lukashevich, M.M. Texture Clustering of Satellite Images Using Self-organizing Neural Network / M.M. Lukashevich, R.Kh. Sadykhov // Computing, 2008. V. 7. N. 3. P. 15-21.
3. Shah-Hosseini, H. A TASOM-based algorithm for active contour modeling / H. Shah-Hosseini, R. Safabakhsh // Pattern Recognition Letters, 2003. N. 24. P. 1361–1373.
4. Аникин В.И., Тураева А.А. О возможности обучения искусственной нейронной сети Кохонена с помощью клеточного автомата. // Вектор науки ТГУ, 2011. № 3 (17). С. 22-24.
5. Аникин В.И. Обучение искусственной нейронной сети Кохонена клеточным автоматом / В.И. Аникин, А.А. Карманова // Информационные технологии, 2014. № 11.
6. Kaneko, K. Period doubling of kink-antikink patterns, quasiperiodicity in antiferro-like structures and spatial intermittency in coupled map lattices // Prog. Theor. Phys., 1984. V. 72. P. 480-486.
7. Аникин В.И., Аникина О.В. Визуальное табличное моделирование клеточных автоматов в Microsoft Excel: Монография. Тольятти: Изд-во ПВГУС, 2013.

С.А. ДОЛЕНКО, И.Н. МЯГКОВА, И.Г. ПЕРСИАНЦЕВ

НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобелыцина МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
dolenko@srd.sinp.msu.ru, irina@srd.sinp.msu.ru

НЕЙРОСЕТЕВАЯ СЕГМЕНТАЦИЯ МНОГОМЕРНЫХ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ МАГНИТОСФЕРЫ ЗЕМЛИ*

В работе представлен предварительный анализ результатов сегментации при помощи нейронных сетей Кохонена многомерных временных рядов данных о параметрах солнечного ветра, межпланетного магнитного поля, геомагнитных индексов (амплитуды Dst-вариации) и потока электронов внешнего радиационного пояса Земли с энергией >2 МэВ. Ожидается, что данный метод исследования позволит продвинуться в понимании динамики магнитосферы Земли, а также улучшить качество и увеличить горизонт прогнозов исследуемых величин.

Ключевые слова: *сегментация, прогнозирование, релятивистские электроны внешнего радиационного пояса Земли.*

S.A. DOLENKO, I.N. MYAGKOVA, I.G. PERSIANTSEV

Skobel'syn Institute of Nuclear Physics Lomonosov Moscow State University

NEURAL NETWORK SEGMENTATION OF MULTI-DIMENSIONAL TIME SERIES AS AN INSTRUMENT FOR STUDY OF DYNAMICS OF THE EARTH'S MAGNETOSPHERE

This paper presents preliminary analysis of the results of multi-dimensional time series segmentation by means of Kohonen neural networks. The time series includes parameters of solar wind, interplanetary magnetic field, geomagnetic indexes (Dst-variation) and the flux of relativistic electrons of the outer Earth's radiation belt with energy > 2 MeV. It is expected that this method of study will allow one to advance in understanding of the dynamics of the Earth's magnetosphere, to improve quality and to increase the prediction horizon for the studied quantities.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 14-01-00293-а.

Keywords: *clusterization, Kohonen self-organizing maps, prediction horizon, relativistic electrons of the outer radiation belt of the Earth, geomagnetic index.*

Введение

Магнитосфера – это область пространства вокруг небесного тела, в которой поведение окружающей тело плазмы определяется магнитным полем этого тела. Радиационные пояса Земли (РПЗ) представляют собой внутренние области магнитосферы Земли, в которых геомагнитным полем (близким к дипольному) удерживаются заряженные частицы – электроны, протоны, альфа-частицы.

Магнитосфера Земли представляет собой многокомпонентную динамическую систему, открытую для внешних воздействий. Изменение её состояния вызывается вариациями межпланетного магнитного поля (ММП) и процессами, происходящими в солнечном ветре (СВ).

Исследования динамики этой системы носят фундаментальный характер, важный для физики магнитосферы Земли, поскольку ни общепринятых моделей развития геомагнитных бурь, ни адекватно описывающих экспериментальные данные механизмов ускорения электронов в магнитосфере до релятивистских энергий пока не существует.

С другой стороны, прогнозирование временных рядов как геомагнитного Dst-индекса, так и потоков релятивистских электронов внешнего РПЗ важно с прикладной точки зрения в рамках прогноза космической погоды. Под этим термином понимают процессы и явления, происходящие на Солнце, в солнечном ветре, магнитосфере и ионосфере Земли, которые могут влиять на работу бортовых и наземных технологических систем, а также на самочувствие людей. Основная причина сбоев космической электроники – это релятивистские электроны (РЭ) внешнего РПЗ, потоки которых возрастают на порядок и более после геомагнитных возмущений (см., например, [1]). Поэтому прогнозы как магнитных бурь, так и самих потоков электронов внешнего РПЗ становятся все более необходимыми из-за возрастания роли космической отрасли.

Уровень возмущенности магнитосферы Земли описывается при помощи геомагнитных индексов – Dst, Kp, AE и др. Амплитуда планетарных возмущений описывается с помощью Dst-вариации. Она представляет собой максимальное отклонение вариации магнитного поля Земли от спокойного уровня, усредненное по значениям, измеренным на контрольной цепочке магнитных станций, расположенных в низких широтах, то есть вблизи экватора [2]. Информацию об экспериментально измеренных зна-

чениях Dst-вариации предоставляет отделение Всемирного центра данных (World Data Center), находящегося в Киото (Япония) [3].

Источниками геомагнитных возмущений могут являться как корональные выбросы массы (КВМ), достигающие орбиты Земли, так и высокоскоростные потоки СВ. Необходимым, а возможно и достаточным, условием возникновения геомагнитного возмущения является присутствие южной (отрицательной) компоненты ММП B_z , при наличии которой возможна передача энергии от солнечного ветра в магнитосферу.

Радиационные пояса Земли в первом приближении представляют собой тороид, в котором можно выделить две области – внутренний и внешний РПЗ (см., например, [4-6]).

Следует учитывать, что внешний РПЗ, состоящий преимущественно из электронов – это (как и вся магнитосфера) сложная динамическая система, параметры которой очень сильно меняются в зависимости от состояния межпланетной среды, в частности, от вариаций параметров ММП, СВ и от геомагнитной возмущенности, которая, в свою очередь, описывается при помощи Dst и Кр-индексов.

Развитие процессов в цепочке «ММП – СВ – магнитосфера Земли» можно описать при помощи многомерных временных рядов, включающих в себя параметры ММП – модуль вектора ММП и три его компоненты; параметры СВ – скорость, плотность, температуру плазмы СВ, а также геомагнитные индексы – Dst и Кр. Изменения потока РЭ внешнего РПЗ, который является частью внутренней земной магнитосферы, также вызываются изменениями параметров ММП и СВ и, кроме того, тесно связаны с возмущениями магнитного поля Земли, описываемыми Dst и Кр.

Следует также отметить, что процессы, происходящие в магнитосфере Земли (и во внешнем РПЗ, в частности), имеют нелинейный и релаксационный характер. Следствием этого является тот факт, что как сама магнитосфера, так и внешний РПЗ имеют определенную «память», то есть их мгновенное состояние определяется не только мгновенными значениями внешних параметров, но и их предысторией. При этом длительность «памяти» и релаксационных процессов в случае внешнего РПЗ, скорее всего, различны для разных состояний магнитосферы. Исходя из экспериментальных фактов [7], нельзя исключить, что при разных состояниях магнитосферы ключевыми параметрами, влияющими на её состояние, будут разные параметры ММП и СВ с разными задержками относительно текущего момента времени.

Все сказанное выше побудило нас попытаться использовать сегментацию многомерных временных рядов (ВР), чтобы, с одной стороны, попробовать понять закономерности функционирования цепочки «ММП–

СВ–магнитосфера», а с другой – попытаться существенно улучшить качество прогноза за счет тренировки раздельных нейросетевых моделей прогнозирования для выделенных типов сегментов.

Настоящая работа посвящена разработке методики сегментации многомерного ВР (с декабря 1997 по март 2014 года) параметров СВ, ММП, значений геомагнитных индексов Dst и Kp, а также потоков электронов внешнего РПЗ с энергией >2 МэВ, при помощи сетей Кохонена, для решения описанных задач.

Методика сегментации многомерных временных рядов

Для сегментации описанных многомерных ВР в настоящей работе используются алгоритмы кластеризации данных. При этом объектами, подлежащими кластеризации, являются отдельные точки многомерного ВР с погружением. Отнесённые к одному и тому же кластеру соседние точки ВР объединяются в сегмент. Таким образом, можно говорить о выделении сегментов нескольких различных типов – по числу полученных кластеров.

Целью сегментации является выявление различных областей связанных состояний ММП, СВ и магнитосферы Земли. Поэтому предлагаемый подход можно будет считать успешным, если удастся сопоставить каждому типу сегмента физически отличное от других состояние рассматриваемой динамической системы.

Известно, что любой алгоритм кластеризации использует понятие расстояния между точками кластеризуемого множества. Поэтому результат кластеризации может существенно зависеть как от набора входных параметров, так и от их взаимной нормировки. Следовательно, для решения основной задачи необходимо определить оптимальный набор входных параметров (и способов их нормировки), в пространстве которых получаемая сегментация является наиболее контрастной и объяснимой с точки зрения ранее известных физических процессов.

В качестве подхода к первичной сегментации ВР можно использовать кластеризацию входящих в него состояний в небольшое количество классов (кластеров), с последующим возможным учётом ограничений, накладываемых с целью устранения возможных «переколебаний» по ходу ВР при отнесении каждого состояния к тому или иному кластеру. При этом первичная кластеризация (до наложения ограничений) вообще не требует никаких предположений о времени существования и характере смены типов состояний.

В качестве основного алгоритма кластеризации в данной работе мы использовали нейронную сеть (НС) Кохонена [8-9]. Отметим, что у авто-

ров уже имеется некоторый опыт подобных работ (например, [10]). Результатом обучения сети Кохонена является распределение немногочисленных нейронов сети в исходном пространстве признаков (ИПП) в соответствии с плотностью распределения многочисленных примеров обучающей выборки в том же пространстве. Это позволяет, задавая количество нейронов N сети Кохонена, осуществлять кластеризацию примеров, выделяя не более N кластеров. Таким образом, при малом N НС Кохонена применяется для решения задачи кластеризации.

При сравнительно больших значениях N и двумерной топологии сети можно рассматривать пространство сети как двумерную карту (т.н. самоорганизующуюся карту Кохонена, СОК) и анализировать положение отдельных примеров на этой карте.

Самоорганизующаяся карта Кохонена осуществляет нелинейное отображение ИПП, имеющего высокую размерность, на двумерное пространство карты, с сохранением соотношений близости между разными примерами. Это позволяет эффективно использовать такие карты для наглядной визуализации данных, первоначально заданных в многомерных пространствах, что было использовано и в настоящей работе.

Применённая реализация сетей и карт Кохонена [11] использует иерархический подход – вначале строится СОК, затем уже в пространстве карты осуществляется кластеризация в заданное количество кластеров.

Помимо этого, в настоящей работе к тем же данным применялся более традиционный алгоритм k -средних, и проводилось сравнение результатов, полученных разными методами кластеризации.

Источники и подготовка данных

Для сегментации использовались следующие виды данных, аналогичные применявшимся для прогноза потоков релятивистских электронов [4] – ВР среднечасовых значений следующих величин:

а) параметры вектора ММП в системе GSM в точке Лагранжа L1 между Землёй и Солнцем: V_x (х-компонента ММП); V_y (у-компонента ММП); V_z (z-компонента ММП); амплитуда V (модуль ММП) (нТл);

б) параметры СВ в той же точке Лагранжа L1: скорость СВ V (км/с); плотность протонов в СВ n_p (см⁻³); температура СВ (К). Как и в [4], в настоящей работе использовались данные КА ACE (Advanced Composition Explorer, [12]), полученные с помощью приборов MAG и SWEPAM (Solar Wind Electron Proton Alpha Monitor);

в) геомагнитные индексы: экваториальный геомагнитный индекс Dst (нТл); глобальный геомагнитный индекс Kp (безразмерный). Возмущён-

ному состоянию магнитосферы соответствуют большие по модулю отрицательные значения Dst (ниже -30 нТл) и большие значения Kp (4 и более). Здесь использовались данные, полученные от Всемирного центра геомагнетизма в Киото (Япония) [13];

г) поток релятивистских электронов на геостационарной орбите с энергиями >2 МэВ ($(\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{ср})^{-1}$). В качестве данных о потоке электронов использовались данные с КА серии GOES [14], полученные с интерактивного ресурса космофизических данных (Space Physics Interactive Data Resource – SPIDR) [15].

Для учёта предыстории входных признаков использовалось погружение всех ВР на глубину в 24 часа.

Как уже отмечалось в [4], поток релятивистских электронов имеет широкий динамический диапазон значений, составляющий более 6 порядков величины. Это сделало необходимым использовать при работе с ИНС перевод значений величины в логарифмический масштаб.

Архитектура и параметры НС, примеры самоорганизующихся карт

Как было указано выше, в данной работе использовалась реализация СОК и НС Кохонена в программном пакете Deductor 5.3 [11]. Сеть состояла из 16×12 или из 8×6 шестиугольных ячеек с евклидовой функцией расстояния. Начальная скорость обучения составляла 0,5, конечная скорость обучения – 0,005. Длительность обучения – 500 эпох. Количество полученных кластеров варьировалось от 3 до 7.

На рис. 1 представлены СОК с ячейками 16×12 , полученные для 3 кластеров, для текущих значений индекса Dst, амплитуды вектора ММП и скорости СВ. Четвертая панель показывает принадлежность ячеек к кластерам. Градациями серого цвета показано среднее значение соответствующего параметра для каждой ячейки. В данной серии вычислительных экспериментов значения индекса Kp и потока РЭ в качестве входных данных не использовались.

Более светлый цвет соответствует более высоким значениям параметров (см. цветовую легенду под каждой из панелей). Видно, что более сильные бури (с большей по модулю отрицательной амплитудой Dst – более темный цвет) соответствуют наиболее высоким значениям скорости СВ, что согласуется с экспериментальными данными. Выбранное на данном этапе число кластеров, равное трём, в значительной мере обусловлено физическими причинами – есть спокойный период, когда бурь нет, а также у каждой бури имеются две ярко выраженные фазы – главная фаза и

фаза восстановления. Представляется, что это и есть три наиболее физически различных класса состояний магнитосферы Земли.

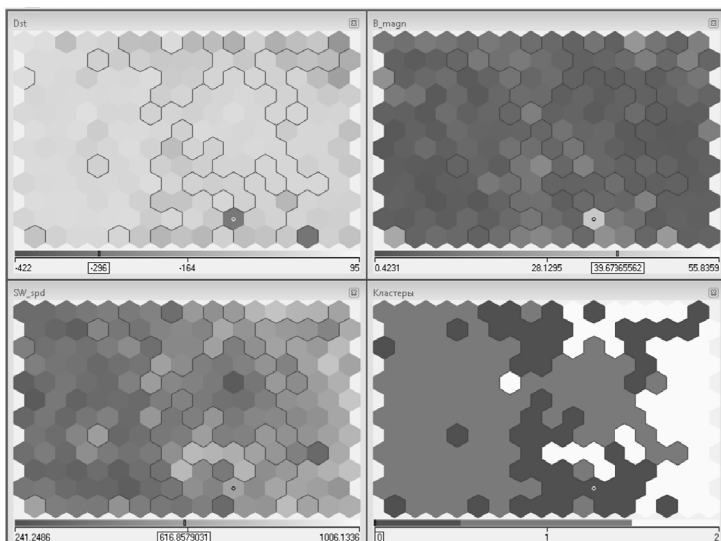


Рис. 1. Самоорганизующиеся карты для исследования Dst, для 3 кластеров

На рис. 2 представлены СОК для второй серии вычислительных экспериментов, в которой использовались все перечисленные выше типы входных данных, включая значения потока РЭ. Представляется, что число физически различных состояний внешнего РПЗ существенно больше, чем три. Поэтому трёх кластеров в данном случае оказывается недостаточно. Представлены карты с ячейками 16x12, полученные для 5 кластеров, для Кр (взаимосвязь потока электронов с индексом Кр значительно сильнее, чем с Dst) и скорости СВ 12 часов назад, и логарифма потока РЭ внешнего РПЗ. Четвертая панель, как и на рис. 1, показывает принадлежность ячеек к кластерам.

Из рис. 2 видно, что кластерам с максимальным потоком электронов (кластеры 1 и 4) соответствуют максимальная скорость СВ 12 ч назад и сравнительно большие значения индекса Кр 12 ч назад.

Полученные кластеры были интерпретированы следующим образом:

0 – минимальный поток электронов, Кр и скорость СВ также низкие – ситуация, характерная для минимума солнечной активности;

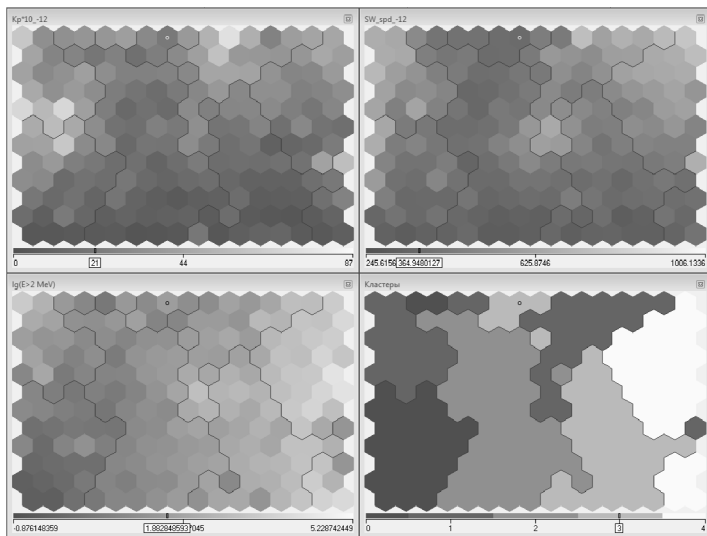


Рис. 2. Самоорганизующиеся карты для исследования потоков электронов внешнего РПЗ, для 5 кластеров

1 – большие значения Кр, скорости СВ и модуля поля В, интерпретируется нами как главная фаза магнитной бури, когда поток электронов РПЗ падает от высокого до минимального уровня;

2 – низкие значения скорости СВ, Кр, поток электронов низкий, но выше, чем для кластера 0 – состояние внешнего РПЗ в отсутствие бури;

3 – более высокие значения всех величин, чем для кластера 2, но ниже, чем для кластера 4; интерпретируется нами как окончание фазы восстановления, когда поток электронов постепенно падает;

4 – максимальный поток электронов, максимальные значения скорости СВ 12 часов назад, интерпретируется как максимальный рост потока электронов РПЗ, опасный для космической аппаратуры.

Результаты и их обсуждение

На рис. 3 приведены результаты сегментации ВР путём кластеризации с помощью НС Кохонена (пунктир) и методом k -средних (серая сплошная линия) для периода времени с 1 марта по 15 мая 2005 г. При анализе с точки зрения адекватного воспроизведения физической ситуации был выбран вариант кластеризации с тремя кластерами.

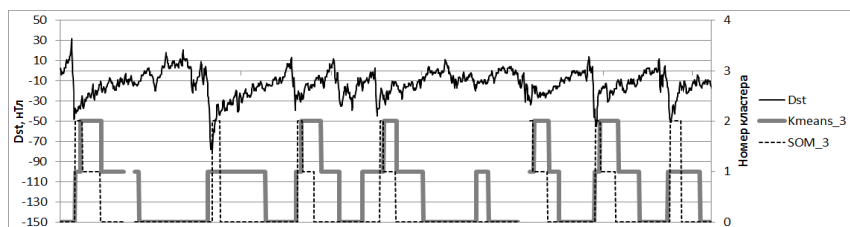


Рис. 3. Результаты сегментации многомерного ВР параметров СВ, ММП, Dst для исследования Dst-вариации с 01.03 по 15.05.2005

Для метода карт Кохонена (пунктирная линия) полученные сегменты можно достаточно уверенно отождествить следующим образом: «0» – нет бури, «1» – фаза восстановления, «2» – главная фаза. Как видно из Рис. 3 для данного периода времени, сегментация при помощи СОК выглядит более обоснованно с физической точки зрения – «ловится» главная фаза, фаза восстановления идет следом за главной фазой, а не предшествует ей.

На рис. 4 показаны результаты сегментации ВР путём кластеризации с помощью НС Кохонена (пунктир) и методом k -средних (серая сплошная линия) для периода времени с 1 февраля по 25 мая 2010 г.

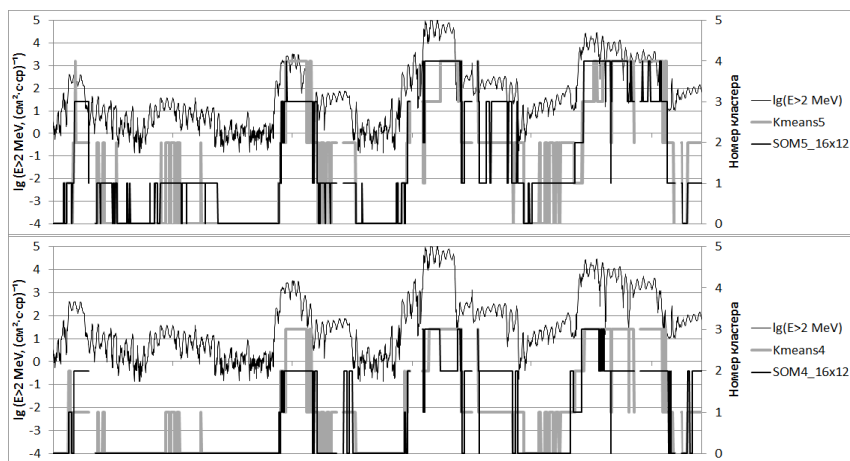


Рис. 4. Сравнение результатов сегментации многомерного ВР параметров СВ, ММП, геомагнитных индексов и электронов внешнего РПЗ для исследования вариации потоков электронов РПЗ с 01.02 по 25.05.2010 г.: для 5 кластеров – верхняя панель, для 4 кластеров – нижняя панель

Такой период выбран, потому что он соответствовал периоду активного роста потоков электронов внешнего РПЗ. Вариант с 5 кластерами представлен на верхней панели рис. 4, с 4 – на нижней. Из рис. 4 видно, что вариант с пятью кластерами лучше соответствует состояниям внешнего РПЗ, описанным в предыдущем разделе. Сегментация при помощи k -средних более чувствительна к изменению потока при малых значениях потока электронов, но менее стабильна в отношении высоких частот переключения из одного кластера в другой и обратно.

Выводы

В работе приведены первые результаты сегментации многомерных временных рядов параметров СВ, ММП, геомагнитных индексов и потоков электронов внешнего РПЗ путём кластеризации при помощи сетей Кохонена и k -средних и проведено их сравнение.

Показано, что получаемая при помощи описанного метода сегментация ВР может иметь адекватную физическую интерпретацию, что говорит о применимости данного метода для исследования динамики магнитосферы Земли. Отметим, что метод работает для разных физических величин – в данном случае это индекс Dst и поток электронов внешнего РПЗ.

Наилучшие с точки зрения физического смысла обнаруженные варианты сегментации были получены при помощи СОК с топологией 16x12 ячеек, с 5 кластерами для электронов и с 3 кластерами для Dst.

Список литературы

1. Iucci N., Levitin A.E., Belov A.V. et al. Space weather conditions and spacecraft anomalies in different orbits // Space Weather. V. 3. № 1. P. S01001. 2005.
2. Лазутин Л.Л. Мировые и полярные магнитные бури. МГУ, 2012.
3. Интернет-портал Всемирного Центра Данных (Geomagnetic Equatorial Dst Index Home Page). URL: <http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/dstdir/index.html>
4. Широкий В.Р., Мягкова И.Н., Персианцев И.Г. Нейросетевое прогнозирование потоков релятивистских электронов внешнего радиационного пояса Земли. // XVI Всероссийская научно-техническая конференция "Нейроинформатика-2014". Т.2. С. 253–263. НИЯУ МИФИ, М., 2014.
5. Кузнецов С.Н., Тверская Л.В. Модель космоса. Т. I. Физические условия в космическом пространстве. Глава 2. Радиационные пояса Земли (под ред. проф. Панасюка М.И.). Университет, Книжный дом. М., 2007. С. 627-641.
6. Friedel R.H., Reeves W.G.P., Obara T. Relativistic electron dynamics in the inner magnetosphere – A review // J. Atmos. Solar. Terr. Phys. V. 64. P. 265–283. 2002.
7. Kataoka R. and Miyoshi Y. Average profiles of the solar wind and outer radiation belt during the extreme flux enhancement of relativistic electrons at geosynchronous orbit // Ann. Geophys. V. 26. P. 1335-1339, 2008.

8. Kohonen, T. Self-Organizing Maps. 3d Edition. Berlin etc., Springer, 2001.
9. Vrieze O.J. Kohonen network. In: P.J.Braspenning, F.Thuijsman, A.J.M.M.Weijters (Eds.). Artificial Neural Networks. An introduction to ANN theory and practice. Lecture Notes in Computer Science, Vol.931. Springer, 1995. Pp.83-100.
10. Dolenko, S.A., Orlov, Yu.V., Persiantsev, I.G., Shugai, Ju.S. Neural Network Algorithm for Events Forecasting and Its Application to Space Physics Data // Lecture Notes in Computer Science, 2005. V. 3697. P. 527-532.
11. Аналитическая платформа Deductor 5.3. URL: <http://www.basegroup.ru>
12. Интернет-страница проекта Advanced Composition Explorer (ACE). URL: <http://www.srl.caltech.edu/ACE/>
13. Страница предоставления данных по геомагнетизму Всемирного Центра Данных в Киото (Geomagnetic Data Service). URL: <http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/wdc/Sec3.html>
14. Сайт проекта GOES (Geostationary Operational Environmental Satellite). URL: <http://rsd.gsfc.nasa.gov/goes/>
15. Интерактивный ресурс предоставления данных по космической физике (Space Physics Interactive Data Resource – SPIDR: SPIDR Home). URL: <http://spidr.ngdc.noaa.gov/spidr/>

М.А. ПРОТАСОВА

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
protasyk@gmail.com

НЕЙРОСЕТЕВОЙ КЛАССИФИКАТОР АНОМАЛИЙ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ

Рассмотрено применение искусственных нейронных сетей к решению задачи распознавания и классификации аномалий в телекоммуникационной сети. Рассмотрена реализация нейросетевого классификатора с использованием языка программирования R. Выбрано признаковое пространство и сформирована обучающая выборка нейронной сети. Представлена реализация классификатора аномалий телекоммуникационной сети.

Ключевые слова: обучающая выборка, телекоммуникационная сеть, нейросетевой классификатор.

M. A. PROTASOVA

Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI"

NEURAL NETWORK QUALIFIER OF ANOMALY TELECOMMUNICATION

Application of artificial neural networks to solve the problem of recognition and classification of anomalies in the telecommunication-network is considered. The implementation of the neural network classifier using the R programming language is considered. The feature space is selected, and the training sample of neural network is collected. The implementation of the telecommunications network classifier anomalies is presented.

Keywords: *training sample, a telecommunications network, the neural network classifier.*

Введение

Направление информационной безопасности телекоммуникационных сетей, связанное с обнаружением и последующим реагированием на нарушения, появилось и начало активно развиваться в 80-е годы 20-го столетия.

В связи с несовершенством существующих методов защиты компьютерных систем от сетевых атак, разработка новых методов защиты информации, позволяющих повысить уровень защищенности компьютерных систем от несанкционированного воздействия, является актуальной и востребованной. В качестве примеров исследования предметной области можно привести работы [1–5].

Для обнаружения и классификации аномалий используется, как правило, один из трех основных подходов или их комбинация [4]:

- * статистический анализ;
- * экспертные системы;
- * нейронные сети.

Статистический анализ находит применение при обнаружении аномального поведения. Отклонение от среднего значения (т.е. дисперсия) профиля нормального поведения дает сигнал администратору о том, что зафиксирована аномалия. Средние частоты и величины переменных вычисляются для каждого типа нормального поведения (например, количество входов в систему, количество отказов в доступе, время суток и т.д.).

О возможных атаках сообщается, когда наблюдаемые значения выпадают из нормального диапазона, т.е. превышают заданный порог [3,4,5].

Экспертная система – это система, которая в контексте обнаружения атак принимает решение о принадлежности того или иного события к классу атак на основании имеющихся правил. Правила основаны на опыте специалистов и хранятся в специальном хранилище. Правила экспертной системы опираются на так называемые сигнатуры, которые и ищутся в признаковом пространстве [4].

Нейронная сеть способна анализировать сетевой трафик с целью обнаружения аномального поведения при установлении соединения узлов. Вероятность правильного определения аномалии, ее типа и класса зависит от качества проведенного ранее обучения и обобщающей способности нейронной сети [6].

Методик построения нейронных сетей достаточное количество, одни используются чаще, другие реже. Тем не менее, можно с уверенностью сказать, что не существует четкого алгоритма, используя который, можно выбрать архитектуру сети, оптимально подходящую для решения конкретной задачи. Поэтому, исследователи, как правило, пользуются наиболее доступными с их точки зрения методами и инструментами моделирования нейронных сетей.

Данная работа посвящается исследованию возможностей инструментальных средств языка программирования R при решении задач нейросетевой классификации аномалий телекоммуникационных сетей.

Данные для обучения

В качестве базы данных для обучения и проверки классификатора была использована база KDD-99 [7]. База данных сформирована на основе дампов трафика в реальной сети, в которой тестировались несколько систем обнаружения атак в 1999-м году [7]. Эта база содержит 5 миллионов упорядоченных записей с 41 атрибутом.

Каждая запись промаркирована классом, к которому она относится: это либо нормальное соединение (normal), либо одна из 22 аномалий, которые в свою очередь можно разделить еще на 4 типа (DoS, U2R, R2L и Probe).

DoS атаки – это сетевые атаки, направленные на создание ситуаций, при которых в рамках атакуемой системы происходит отказ в обслуживании. Данные атаки характеризуются генерацией большого объема трафи-

ка, что приводит к перегрузке и блокированию сервера. Выделяют шесть DoS атак: back, land, neptune, pod, smurf, teardrop.

U2R атаки предполагают получение зарегистрированным пользователем привилегий локального сетевого администратора. Выделяют четыре типа U2R атак: buffer_overflow, loadmodule, perl, rootkit.

R2L атаки характеризуются получением доступа незарегистрированного пользователя к компьютеру со стороны удаленного компьютера. Выделяют восемь типов R2L атак: ftp_write, guess_passwd, imap, multihop, phf, spy, warezclient, warezmaster.

Probe атаки заключаются в сканировании сетевых портов с целью получения конфиденциальной информации. Выделяют четыре типа Probe атак: ipsweep, nmap, portsweep, satan.

Таким образом, в контексте построения классификатора сети мы имеем 41 вход и 23 выхода (22 аномалии и нормальное состояние) нейронной сети.

Следует отметить, что в базе данных не все аномалии представлены достаточным для обучения количеством записей. Так, например, аномалия loadmodule представлена всего лишь девятью примерами, а spy – двумя. Имея в виду исходную неравномерность распределения обучающих примеров, можно упростить исходную задачу до распознавания нормального и аномального состояния сети. Таким образом, в исходную выборку включается 150 значений нормального состояния, по 80 значений часто повторяющихся аномалий, и все значения недостаточно представленных аномалий.

Для задачи классификации угроз имеет смысл рассматривать только 10 состояний телекоммуникационной сети (9 аномалий нормальное состояние), так как остальные 12 классификатор не сможет распознавать достоверно ввиду малого объема примеров. Согласно источникам [4,7] для обнаружения и классификации 9 часто встречающихся атак достаточно 29 параметров, характеризующих сетевые соединения. Список этих параметров приведен в табл. 1.

В контексте сформулированной таким образом задачи имеется 29 входов и 10 выходов нейронной сети. Первоначальная выборка была должным образом скорректирована. Для обеспечения более равномерного обучения выбиралось по 100 примеров каждого рассматриваемого состояния. В данном примере нормальное состояние сети никак не выделялось.

Перед использованием выборок для обучения сетей все значения параметров были подвергнуты нормировке.

Таблица 1

Список анализируемых параметров

№	Название параметра	Пояснение
1	duration	Продолжительность соединения
2	protocol_type	Тип протокола
3	service	Служба
4	flag	Флаг терминального состояния IP-соединения
5	src_bytes	Количество байт, переданных от источника к приемнику
6	dst_bytes	Количество байт, переданных от приемника к источнику
7	land	Равенство порта отправителя порту получателя
8	wrong_fragment	Количество отброшенных пакетов
9	urgent	Число пакетов с флагом URG
10	hot	Количество hot-индикаторов
11	count	Количество соединений между удаленным хостом и локальным хостом
12	srv_count	Количество соединений к локальной службе
13	error_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа syn для данного хоста-источника
14	srv_error_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа SYN для данной службы источника
15	rerror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа REJ для данного хоста-источника
16	srv_rerror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа REJ для данной службы источника
17	same_srv_rate	Процентное число соединений к службе
18	diff_srv_rate	Процентное число соединений к различным службам
19	srv_diff_host_rate	Процентное число соединений к различным хостам
20	dst_host_count	Количество соединений к локальному хосту, установленных удаленной стороной
21	dst_host_srv_count	Количество соединений к локальному хосту, установленных удаленной стороной и использующих одну и ту же службу
22	dst_host_same_srv_rate	Процентное число соединений к локальному хосту, установленных удаленной стороной и использующих одну и ту же службу
23	dst_host_diff_srv_rate	Процентное число соединений к локальному хосту, установленных удаленной стороной и использующих различные службы

№	Название параметра	Пояснение
24	dst_host_same_src_port_rate	Процентное число соединений к данному хосту при текущем номере порта источника
25	dst_host_srv_diff_host_rate	Процентное число соединений к службе разных хостов
26	dst_host_serror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа syn для данного хоста-приемника
27	dst_host_srv_serror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа SYN для данной службы приемника
28	dst_host_rerror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа REJ для данного хоста-приемника
29	dst_host_srv_rerror_rate	Процентное число соединений с ошибкой типа REJ для данной службы приемника

Обучение сети

Одним из важнейших свойств нейронной сети является ее способность к обучению на основе поступающих данных. Сокращение количества ошибок производится за счет определенных правил с течением времени. Алгоритм обучения нейронной сети с учителем был выбран с учетом структуры базы данных KDD CUP99,.

В работе для построения нейросетевого классификатора используется двухслойная нейронная сеть прямого распространения.

Обучающая выборка при полном наборе аномалий составлена из 1128 строк с 41 параметром, а при ограничении до 9 наиболее представленных – из 1000 строк с 29 параметрами. Выходы сети (целевое множество) кодируются унарным кодом. Следует отметить и то, что все манипуляции, производимые с обучающей выборкой, осуществлялись с использованием функционала R programming language.

Для работы с нейронной сетью на официальном сайте R-сообщества CRAN имеются два пакета. Это "neuralnet" и "nnet" [8]. Оба имеют как плюсы, так и минусы, хотя по функциональности практически идентичны. Решающим фактором в выборе пакета стало то, что пакет "nnet" поддерживает стандарт PMML, что немаловажно при необходимости использования полученной нейронной сети в других статистических системах [9].

Пакет "nnet" содержит несколько функций, позволяющих работать как с нейронной сетью, так и с лог-линейными моделями. Для обучения сети предназначена функция "nnet", а для использования в режиме классификации – "predict".

Параметры функции "nnet", использованные при проведении эксперимента, приведены в табл. 2.

Модель функции "nnet"

x	Вектор/матрица	Матрица или набор значений для обучения (исходные данные).
y	Вектор/матрица	Матрица или набор целевых данных для обучения.
size	Целое положительное число или 0	Количество нейронов в скрытом слое. Может быть 0, если есть обходные соединения.
Wts	Вектор/матрица	Начальный вектор весов сети. Если отсутствует, генерируется случайным образом.
linout	TRUE/FALSE	Переключатель на линейное отображение выходных данных. По умолчанию установлена логическая система единиц.
skip	TRUE/FALSE	Переключатель, добавляющий обходное соединение от входа к выходу.
decay	Малое число	Параметр распада веса. По умолчанию - 0.
maxit	100	Максимальное число итераций (эпох).
trace	TRUE/FALSE	Переключатель для отслеживания оптимизации. Значение по умолчанию - true.
abstol	1.0e-4	Если критерий ошибки становится меньше abstol, то задача обучения выполнена.
reitol	1.0e-8	Остановка, если оптимизатор не может уменьшить нужный критерий хотя бы на одну величину reitol.

По умолчанию в функции используются следующие параметры:

```
nnet(x, y, size, Wts, linout = FALSE,
     skip = FALSE, decay = 0,
     maxit = 100, trace = TRUE,
     abstol = 1.0e-4, reitol = 1.0e-8, ...)
```

При построении нейронной сети используется сигмоидальная функция активации нейронов и метод наименьших квадратов для минимизации ошибки в процессе обучения. Так как единых правил для определения структуры нейронной сети нет, для построения классификатора использовался алгоритм подбора критериев. Основными задачами подбора являлись:

1) подбор параметров сети так, чтобы ответ классификатора был максимально приближен к действительности. Для выполнения этой задачи был создан зацикленный алгоритм подбора параметров;

2) минимизация вероятность переобучения. В алгоритм подбора параметров была добавлена проверка на переобучение с помощью тестовой выборки.

Алгоритм подбора:

Шаг 1. Выбираются параметры сети.

Шаг 2. Обучающая выборка делится случайным образом на 2 части, так, чтобы в обучающей и тестовой выборках было примерно равное количество записей каждого состояния сети. Создаются эталоны выходов нейронной сети для обеих выборок.

Шаг 3. С использованием функции 'nnet', выбранных параметров и обучающей выборки производится обучение.

Шаг 4. Обученная сеть проверяется с использованием тестовой выборки и функции 'predict' (на тестовой выборке используется обученный классификатор, а затем результат сравнивается с эталоном).

Таким образом, не только подбираются параметры нейронной сети, но и исключается возможность переобучения сети, так как при дальнейшем отборе учитывается не только конечное значение ошибки при обучении, но и процент несоответствий при проверке на тестовой выборке.

В результате были получены следующие параметры для нейронной сети, используемой для классификации всех видов аномалий: 11 нейронов в скрытом слое, коэффициент распада, равный 0,0015, количество эпох 240.

```
nnet(x, y, 11, linout = FALSE,  
      skip = FALSE, decay = 0,0015,  
      maxit = 240, trace = TRUE,  
      abstol = 1.0e-4, reltol = 1.0e-8)
```

И 8 нейронов в скрытом слое, коэффициент распада 0 и количество эпох 180 для классификации 9 видов аномалий.

```
nnet(x, y, 8, linout = FALSE,  
      skip = FALSE, decay = 0,  
      maxit = 180, trace = TRUE,  
      abstol = 1.0e-4, reltol = 1.0e-8)
```

Результаты

В качестве результатов представлены данные, полученные при тестировании нейронной сети с наилучшими параметрами.

Табл. 3 представляет результаты обучения нейронной сети в случае, когда в тестовую выборку входили все аномалии. Как и предполагалось, суммарная погрешность определения аномалий велика, в то время как погрешность определения нормального состояния мала.

Таблица 3

Визуализация результатов обучения

№	Имя выхода НС	Полученный результат	Эталон	Погрешность
1	<i>normal</i>	76	75	1%
2	<i>back</i>	38	40	5%
3	<i>buffer overflow</i>	12	15	20%
4	<i>ftp write</i>	2	4	50%
5	<i>guess passwd</i>	26	27	4%
6	<i>imap</i>	3	6	50%
7	<i>ipsweep</i>	40	40	0%
8	<i>land</i>	9	10	10%
9	<i>loadmodule</i>	0	5	100%
10	<i>multihop</i>	0	4	100%
11	<i>neptune</i>	39	40	3%
12	<i>nmap</i>	36	40	10%
13	<i>perl</i>	0	2	100%
14	<i>phf</i>	2	2	0%
15	<i>pod</i>	39	40	3%
16	<i>portsweep</i>	40	40	0%
17	<i>rootkit</i>	0	5	100%
18	<i>satan</i>	34	40	15%
19	<i>smurf</i>	40	40	0%
20	<i>spy</i>	0	1	100%
21	<i>teardrop</i>	38	40	5%
22	<i>warezclient</i>	40	40	0%
23	<i>warezmaster</i>	10	10	0%
Итоговая погрешность				29%

Для следующего эксперимента выборка была осуществлена только среди аномалий, представленных в достаточном количестве и нормально-го состояния.

В табл. 4 показаны результаты обучения нейронной сети без включения в выборку аномалий, представленных менее 100 раз в базе данных. По горизонтали представлены полученные результаты, а по вертикали – ожидаемые. Таким образом, в случае идеального обучения получилась бы диагональная матрица.

Средняя погрешность определения аномалий в данном примере на порядок меньше, чем в предыдущем, из чего следует вывод о том, что данные, представленные в недостаточном количестве, существенно искажают результат классификации и усложняют работу алгоритма.

Таблица 4

Визуализация результатов обучения

№	Имя	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Эталон	Погрешность
1	<i>normal</i>	50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	50	0%
2	<i>back</i>	1	49	0	0	0	0	0	0	0	0	50	2%
3	<i>neptune</i>	0	0	49	0	0	0	1	0	0	0	50	2%
4	<i>pod</i>	0	0	0	50	0	0	0	0	0	0	50	0%
5	<i>smurf</i>	0	1	0	1	46	0	0	2	0	0	50	8%
6	<i>teardrop</i>	0	0	0	0	0	48	2	0	0	0	50	4%
7	<i>ipsweep</i>	3	1	0	0	0	0	46	0	0	0	50	8%
8	<i>nmap</i>	0	0	0	0	1	0	0	49	0	0	50	2%
9	<i>portsweep</i>	0	0	0	1	0	0	0	0	47	2	50	6%
10	<i>satan</i>	0	0	0	0	0	0	0	0	1	49	50	2%
<i>Итоговая погрешность</i>													3,4%

Заключение

Рассмотренный подход к реализации нейросетевого классификатора отличается простотой и основан на построении НС с одним скрытым слоем и сигмоидальной функцией активации. Из полученных результатов можно сделать выводы о том, что R programming language – удобная среда для разработки и использования нейронных сетей. Изучены результаты обучения и подтвержден факт недостаточности некоторых данных в базе KDD CUP99 для полноценного обучения сети.

Следующим шагом исследований планируется организовать комитет нейронных сетей, объединенных для принятия решений.

Список литературы

1. Системы обнаружения компьютерных угроз <http://www.nestor.minsk.by/sr/2008/05/sr80513.html>
2. Гамаюнов Д.Ю. Обнаружение компьютерных атак на основе анализа поведения сетевых объектов. Дисс. на соискание ученой степени. М., 2007
3. Лукацкий А.В. Обнаружение атак. – 2-е изд., перераб. и доп. СПб.: БХВ-Петербург, 2003.
4. Тимофеев А.В., Браницкий А.А. Исследование и моделирование нейросетевого метода обнаружения и классификации сетевых атак// Information Technologies & Knowledge, 2012. V.6. N. 3. С 257-265
5. Технологии обнаружения сетевых атак <http://www.bstu.by/~opo/ru/uni/bstu/science/ids/>

6. Дорогов А.Ю., Абатуров В.С. Экспериментальная оценка обобщающей способности нейронных сетей// "Нейроинформатика-2013". Сб. науч. трудов. Ч.2. М.: НИЯУ МИФИ, 2013. С.244-251.

7. KDD Cup 1999 Data <http://kdd.ics.uci.edu/databases/kddcup99/kddcup99.html>

8. The Comprehensive R Archive Network <http://cran.r-project.org/>

9. Дорогов А.Ю., Абатуров В.С., Раков И.В. РММЛ модели быстрых нейронных сетей и спектральных преобразований// "Нейроинформатика-2013". Сб. науч. тр. Ч.3. М.: НИЯУ МИФИ, 2013. С.156-166.

В.Н. ШАЦ

Независимый исследователь, Санкт-Петербург
vlnash@mail.ru

О НОВОЙ ТЕХНОЛОГИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ В МАШИННОМ ОБУЧЕНИИ

Живые организмы имеют элементы, которые обеспечивают многоуровневую и многократную обработку информации о стимулах по единому правилу. Задача обучения с учителем решается на основе модели этой технологии. Матрица данных рассматривается как один из образов выборки, счетное множество других образов составляют матрицы индексов, которые находятся путем квантования признаков. Индексы приближенно описывают признаки и позволяют найти частоты появления комбинаций индексов, соответствующих объектам определенного класса.

Ключевые слова: *классификация, модель самоорганизующейся системы, обучение с учителем, рандомизация, метрика.*

V.N. SHATS

Independent investigator, St. Petersburg

ON NEW COMPUTING TECHNOLOGY IN MACHINE LEARNING

Living organisms have the elements that provide multi-layered and multiple processing incentives information on a single rule. The task of supervised learning is solved on the basis of the model of this technology. Data matrix is considered as one of the images of the sample, a countable set of other images

are indexes matrix, which are found by the quantization features. Indexes approximately describe the feature and allow us to find the frequency of occurrence of combinations of indices corresponding to objects of a certain class.

Keywords: *classification model of self-organizing systems, supervised learning, randomization, metric.*

Введение

Лозунг "учиться у природы" сохраняет свою актуальность для нейроинформатики. Термин «нейрокомпьютер» отражает близость к биологии и математике, но связан не со свойствами или характеристиками нервной системы, а лишь с названием порогового элемента компьютера [1]. Вместе с тем, нейронные сети животного способны решать задачи распознавания образов намного эффективнее, чем человек с помощью всех достижений современной науки и техники [2]. Объясняется такая ситуация тем, что у животных другая технология обработки информации или, что то же самое, иные принципы вычислений [3].

В настоящей статье развиваются результаты работ [4, 5] по индексному методу машинного обучения, основанному на реализации этих принципов. Они были установлены с помощью теории информации в самоорганизующейся системе, моделирующей биологическую и социальную системы [6]. Эта теория позволяет численно описать движение информации в системе. Она дает феноменологическое описание работы самоорганизующейся системы, не касаясь физической сущности механизмов их работы.

Система организована в виде множества цепей элементов, имеющих иерархическую и параллельную структуру. Все элементы получают информацию от соседних элементов или непосредственно из внешней среды, перерабатывают ее и передают примыкающим элементам согласно закону сохранения информации. В обработке информации участвует множество элементов цепей, включая элементы дублирующих цепей, отличающихся своим состоянием в момент получения соответствующего сигнала и другими характеристиками. В процессе обработки и синхронизации информации возникают неизбежные помехи, и перемещение информации сопровождается ее фильтрацией.

Таким образом, извлечение нужных сведений о стимулах происходит в результате взаимодействия элементов системы, которые выполняют многоуровневую и многократную обработку информации по единым прави-

лам. Эти особенности механизма обработки информации в самоорганизующейся системе нашли свое отражение в новой технологии вычислений в машинном обучении, предложенной в индексном методе решения задачи обучения с учителем [3, 4].

В настоящей статье этот метод получил дальнейшее развитие, когда для всех типов данных используется единый алгоритм, и получил более глубокое обоснование. Кроме того, здесь приведен способ повышения точности решения, основанный на рандомизации данных, в случае некоррелированных признаков.

Согласно индексному методу внутренние закономерности матрицы данных определяются частотами комбинации индексов, которые описывают значения признаков реального объекта в целых числах. Эти частоты учитывают влияние погрешностей измерений и образуют сходящуюся последовательность. Классификация объектов производится методами математической статистики с позиции современного представления о всеобщей связи явлений [7]. При этом метод «обходится» без введения предположений математического характера.

Поэтому метод обладает простотой и универсальностью, свойственной механизмам познания в живой природе. Вместе с тем, по сравнению со всеми другими методами индексный метод обеспечивает более высокую точность результатов при одновременном снижении объема вычислений в сотни и тысячи раз.

В настоящее время все методы решения рассматриваемой задачи исходят из предположения о существовании функциональной зависимости между объектом и классом [8, 9]. Реализация этого допущения требует введения понятия метрики – функции, которая связывает конкретный объект с набором его признаков. Эта функция, определяющая классификацию объектов, выбирается на основании эвристических соображений.

В индексном методе связь между вектором признаков объекта и классом носит не функциональный, а менее жесткий – случайный характер. Здесь объект рассматривается как случайная комбинация признаков, и для объекта любого класса функция плотности вероятности имеет разрывы. Естественно, что метод не направлен на поиск функции, которая в существующих методах устанавливает правило разделения объектов на классы. Поэтому индексный метод практически не имеет точек соприкосновения с современными методами. По этой причине в статье приводится крайне ограниченное число ссылок.

Общие положения индексного метода

Индексный метод в первую очередь предназначен для решения следующей типовой задачи обучения с учителем:

Из бесконечного множества объектов с одинаковыми свойствами, которые характеризуются признаками произвольного типа, случайным образом получена обучающая выборка. Известно распределение ее объектов по непересекающимся классам. Требуется найти классы объектов контрольной выборки.

Пронумеруем объекты, присвоив объектам обучающей выборки номера $s = 1, \dots, t$, а контрольной выборки – $s = t + 1, \dots, Ms$, где t и Ms – количество объектов в обучающей выборке и общее число объектов соответственно. Введем следующие обозначения: q – вектор признаков произвольного объекта; $q_k, k \in (1, M)$ – k -й признак объекта q ; ω_i – множества номеров объектов обучающей выборки класса $i \in (1, Mi)$; $\mathbf{Q}$ – матрица данных объединенной выборки. Для объекта номер s соответствующие величины обозначаются q^s и q_k^s . Величина q_k^s для неколичественного признака находится при оцифровке: она равна номеру варианта значений признака (при произвольном правиле нумерации вариантов).

Класс объекта будем рассматривать как случайное явление, которое зависит от выборки. Образом выборки, полученным в результате измерений признаков реальных объектов со случайными ошибками, является матрица данных $\mathbf{Q}$.

Для раскрытия закономерностей этого явления найдем с помощью оператора $F(n)$ счетное множество образов $\{\mathbf{Q}_n\}$. Для каждого признака оператор $F(n): \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{Q}_n$ реализует процедура квантования, $\mathbf{Q}_n$ – матрица, $n > 1$ – параметр, равный количеству шагов квантования.

Согласно принятой процедуре для признака k интервалы квантования $[q_{k,m}, q_{k,m+1})$ расположены с шагом $\Delta_k = (q_k^{\max} - q_k^{\min}) / (n - 1)$, где $q_{k,m} = q_k^{\min} + (m - 1)\Delta_k$ – левая граница интервала $m = 1, \dots, n$; $q_k^{\min}$ и $q_k^{\max}$ – соответственно минимальное и максимальное значение признака.

Будем называть m индексом признака k , если в него попадает q_k . Тогда $\mathbf{Q}_n$ является матрицей индексов, ее элементами являются индексы m_k^s для признака k объекта s .

Можно видеть, что индекс равен целой части величины q_k / Δ_k . Поэтому квантование равносильно измерению со случайной погрешностью

значения признака. Отсюда следует, что в процессе решения значения признаков многократно измеряются по единым правилам. Поэтому матрицу индексов Q_n можно интерпретировать как рандомизированное отображение множества реальных объектов, входящих в объединенную выборку, которое получено путем статистического моделирования матрицы Q .

Рассмотрим группы объектов обучающей выборки с одинаковыми индексами m для признака k . Введем следующие обозначения: $l_{k,m}^i$ – количество объектов класса i , имеющих индекс m ; $l_{k,m}$ – сумма $l_{k,m}^i$ для всех классов; $h_{k,m}^i = \frac{l_{k,m}^i}{T_i}$; $h_{k,m}^i = \frac{l_{k,m}^i}{T_i}$ и T_i – количество объектов обучающей выборки класса i (длина множества ω_i).

Из правил квантования получим: $l_{k,m}^i \geq 1$, если m_k^s является индексом k -го признака хотя бы одного объекта $s \in \omega_i$. В остальных случаях $l_{k,m}^i = h_{k,m}^i = g_{k,m}^i = 0$. Поэтому величины $h_{k,m}^i$ и $g_{k,m}^i$ представляют собой частоты индекса признака k для любого объекта класса i на интервале $[q_{k,m}, q_{k,m+1})$ при разных вероятностных мерах. Эти частоты дают выборочную оценку соответствующей вероятности, которую обозначим $p_{k,m}^i$. Ее величина находится по данным обучающей выборки, однако, на основании предположения о том, что выборки принадлежат единому множеству, применяется также для объектов контрольной выборки.

Выбор между частотами $h_{k,m}^i$ и $g_{k,m}^i$ для вычисления $p_{k,m}^i$ зависит от особенностей данных и производится эмпирическим путем.

Поскольку по каждому признаку объект принимает только одно значение, то выборочная вероятность того, что объект s имеет класс i , равна

$$p_s^i = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M p_{k,m}^i. \text{ Эта зависимость приводится к виду}$$

$$p_s^i = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M h_{k,m}^i \text{ или } p_s^i = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M g_{k,m}^i. \quad (1)$$

Из этих зависимостей следует, что вероятность p_s^i равна осредненной по всем признакам частоте индекса m_k^s . Согласно методу максимума правдоподобия получим оценку $I(s)$ для класса объекта s :

$$I(s) = \arg \max_{i \in (1, M_i)} p_s^i. \quad (2)$$

Таким образом, поиск правила для определения класса объекта s сводится к простейшим вычислениям средних частот индексов p_s^i для объекта s в предположении, что он принадлежит одному из классов $i = 1, \dots, M$.

Вероятностная сходимость решения

Зависимости (1)-(2) определяют детерминированное значение $I(s)$ для матрицы индексов $\mathbf{Q}_n$. Для последовательности значений n получим последовательности случайных величин, которыми являются матрицы $\mathbf{Q}_n$ и оценки классов $I(s)_n$.

Решение приобретает стохастический характер, и будет зависеть от вероятностной сходимости последовательности $\{I(s)_n\}$. Значение n , при котором достигается приемлемое число ошибок, определяет расчетное значение $I(s)$.

Рассмотрим вопрос сходимости последовательности $\{I(s)_n\}$. При увеличении n шаг Δ_k уменьшается, и группы из $l_{k,m}$ и $l_{k,m}^i$ объектов в общем случае разделяются на более мелкие. Значения признаков дифференцируются при сохранении взаимосвязи между признаками одного объекта. Если $n \rightarrow \infty$, то Δ_k стремится к нулю для всех признаков, а $l_{k,m}$ и $l_{k,m}^i$ достигают своих минимальных значений, соответственно равных количеству объектов всех классов и только класса i , у которых $q_k = q_{k,m}^i$. Эти значения обозначим соответственно $a_{k,m}$ и $a_{k,m}^i$.

Для первого варианта формулы (1) $p_i^s \rightarrow \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M a_{k,m}^i$, для второго - $p_i^s \rightarrow \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M a_{k,m}^i / a_{k,m}$. Первая из этих величин близка к 0, вторая – к 1. Поскольку оба предела конечны, то случайная величина $I(s)_n$ сходится в обычном смысле. Отсюда следует, что метод позволяет получить решение задачи обучения при любых данных.

Зависимость (2) применима к объектам обучающей и контрольной выборок. В первом случае получим значение $I(s)$ для объекта, класс которого i_s известен. Тогда соотношение $I(s)$ и i_s будет характеризовать способность алгоритма обучаться на обучающей выборке – его обучаемость. Во втором случае мы получим оценку точности решения.

Качество обучения будем измерять частотами суммарных ошибок и частотами ошибок для класса i при длине обучающей выборки t , обозначенных σ_t и $\delta_{i,t}$ соответственно. Аналогичными частотами Σ_t и $\Delta_{i,t}$ будем оценивать качество решения.

Качество обучения и решения

Согласно (2) при определении класса объекта S используются частоты $h_{k,m}^i$ или $g_{k,m}^i$, вычисленные как частоты групп из $l_{k,m}^i$ объектов, признаки которых попадают в интервал $[q_{k,m}, q_{k,m+1})$. Погрешность, возникающая при осреднении, снижается с уменьшением размера этих групп. Она будет минимальной, если все объекты будут иметь разные значения каждого признака. Такая ситуация возникает в случае $l_{k,m}^i = 1$ при всех k . В этом случае будет достигнуто безошибочное разделение объектов обучающей выборки на классы, когда ошибки $\sigma_{Ms} = \delta_{1,Ms} = \dots = \delta_{M_i,Ms} = 0$.

Высокое качество обучения не гарантирует приемлемого качества решения задачи, так как обучение только первый этап ее решения. На втором этапе нужно найти частоты $h_{k,m}^i$ или $g_{k,m}^i$ для комбинации индексов, определяющих отдельные объекты контрольной выборки. Каждая из этих частот не равна нулю только при условии, что хотя бы один из объектов обучающей выборки класса i имеет такой же индекс соответствующего признака. Отсутствие такого совпадения ведет к снижению суммы, определяющей среднюю частоту p_i^s , и ошибочной классификации объекта.

Очевидно, качество решения зависит от попадания признаков объектов контрольной выборки в интервалы $[q_{k,m}, q_{k,m+1})$, в которые попадет один из объектов обучающей выборки. При достаточно малых $n \sim 1$ (грубых шкалах) это условие выполняется автоматически. В предельном случае $n \rightarrow \infty$ шаг $\Delta_k \rightarrow 0$ и указанное условие выполняется только в случае равенства соответствующих признаков.

Поэтому соотношение между качеством обучения и качеством решения зависит от особенностей данных, и возникает проблема "переобучения". Если установить ограничение для величины n , то возможно достижение более точного решения на контрольной выборке. Но этот результат может оказаться формальным, не надежным, поскольку одновременно снизится качество обучения. Таким образом, точность решения задачи зависит от особенностей матрицы данных объединенной выборки.

Особенности матрицы данных, влияющие на качество решения

Задача машинного обучения формулируется экспертом, который описывает множество объектов как некоторую совокупность их образов [10]. Каждый образ представляет собой набор разрозненных данных по количественным значениям характеристик объектов, которые могут содержать случайные ошибки. Однако эксперт, руководствуясь своими профессиональными знаниями, обеспечивает идентичность объектов и соответствующих образов, контролируя близость их распределений по классам.

По существу в задаче требуется разделить множество образов на подмножества образов, которые отличаются от остальных особенностями значений признаков. Очевидно, что трудность ее решения возрастает при слабой дифференциации данных, которая характеризуется числом признаков и количеством вариантов каждого из них.

В этом отношении существует разница между матрицами данных для количественных и остальных типов признаков. Обычно для количественных признаков число вариантов значений q_k^s имеет порядок M_s и не превышает 10 для остальных типов признаков. Аналогично соотношение между $a_{k,m}^i$ для выборок с разными типами данных. Поэтому указанные выше погрешности осреднения для количественных признаков будут играть меньшую роль, что приведет к более высокой точности результатов.

Примером низкой вариативности служит задача "Car Evaluation" [11]. Здесь объекты описываются 6 признаками номинального и порядкового типа, а каждый признак принимает одно из 3 или 4 значений, объекты одного из классов совпадают по одному из признаков и подразделяются только на две группы по трем признакам. Вместе с тем, задача осложняется неравномерным распределением объектов по классам, когда в одном из них в 19 раз больше объектов, чем в другом. Поэтому непосредственное применение метода привело к большим ошибкам обучения даже при достаточно больших значениях $n : \sigma_{M_s,n} \approx 0.5$ и вектор $\delta_{M_s,n} \approx (0.5, 0.8, 0.3, 0)$.

Однако понятие количественный признак не имеет общепринятого значения. Например, свойства объекта характеризуются непрерывной зависимостью от признака "возраст". Но в задачах его описывают в различных абсолютных шкалах (годах и месяцах, с округлением до целых или десятых), порядковых и номинальных и других шкалах. Каждый тип шкалы представляет значение признака с разной точностью и степенью дифференциации, которые влияют на степень дифференциации данных и ошибки расчетов.

Анализ показал, что существует принципиальная возможность для управляемого изменения данных задачи при любом типе признаков на основе предположения о том, что мы располагаем только «нечеткой» информацией о величине признаков. При достаточно малой степени вариативности одного или более признаков точность результатов может быть качественно улучшена путем дополнительной рандомизации данных. Подобным образом обрабатываются псевдослучайные помехи в рандомизированных алгоритмах [12].

В алгоритм расчетов вводится следующее изменение: при всех s и k величина q_k^s заменяется на

$$\tilde{q}_k^s = q_k^s + \alpha v_s.$$

Здесь v – случайная величина, равномерно распределенная на отрезке $(0,1)$, α – постоянная, значение которой зависит от исходных данных задачи. При этом предположении по-прежнему остается неопределенным соотношение между реальным значением признака и $\tilde{q}_k^s$ или q_k^s .

Согласно указанной зависимости значения всех признаков объекта s увеличиваются на величину αv_s . В этом случае все объекты будут иметь разные значения по каждому признаку. Тогда при отображении $F(n)$ получим $\tilde{q}_k^s \rightarrow \tilde{m}$ и $a_{k,\tilde{m}}^i = 1$, где $\tilde{m}$ – это значение индекса признака после рандомизации.

Значение α подбирается исходя из противоречивых требований: качество обучения должно быть достаточно высоким, чтобы объекты контрольной выборки были отнесены к классам, которые обладают свойствами классов обучающей выборки.

Одновременно должна быть обеспечена приемлемая точность результатов на контрольной выборке. Каждый из этих показателей оценивается величиной соответствующих ошибок.

Эффект дополнительной рандомизации иллюстрируют результаты расчетов для задачи “Car Evaluation” на рис. 1. Здесь приведены графики, показывающие влияние числа шагов квантования на суммарные ошибки обучения $\sigma_{t,n}$ и классификации $\Sigma_{t,n}$ для 36 вариантов длины обучающей выборки $t(p)$.

Расчеты выполнялись при $\alpha = 1$. Графики показывают, что даже в задаче с достаточно «плохими» данными благодаря дополнительной рандомизации может быть достигнуто практически безошибочное обучение и классификация.

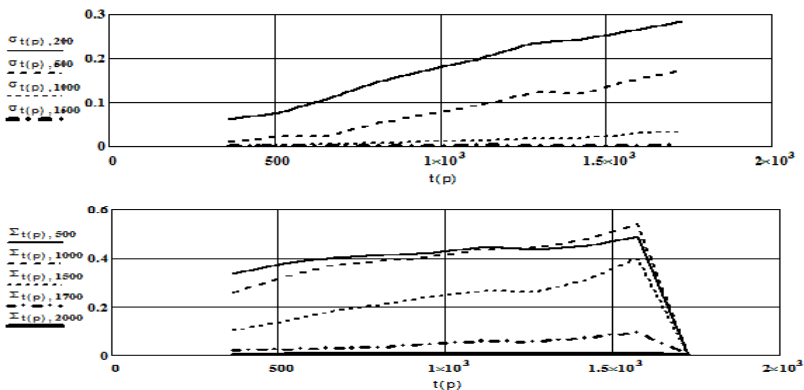


Рис. 1. Влияние числа шагов квантования n на суммарные ошибки обучения $\sigma_{t,n}$ (вверху) и классификации $\Sigma_{t,n}$ (внизу)

Заключение

В работе рассмотрена новая технология вычислений, которая отражает вычислительные принципы распознавания образов, свойственные животным. Ее реализует индексный метод машинного обучения, предназначенный для решения задачи обучения с учителем.

Метод использует простейший и универсальный алгоритм для любых типов данных. Вычисления практически сводятся к подсчету частот групп объектов с разными индексами, которыми оцениваются значения признаков. По сравнению с современными методами точность решения повышается, а объем вычислений снижается на много порядков. При применении метода решение частных задач перестает носить характер исследования, и они становятся доступными широкому кругу пользователей, не обладающих специальной математической подготовкой.

Список литературы

1. Галушкин А.И. Теория нейронных сетей. М.: Радиотехника, 2000. С. 416 (Нейрокомпьютеры и их применение; Кн. 1).
2. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс. – 2-е изд. / Пер. с англ. М. ИД «Вильямс». 2006. С. 1104.
3. Versace M., Chandler B. The brain of a new machine // IEEE Spectrum, 2010. V. 47. P. 30-37.

4. Шац В.Н. Двухуровневая метрика и новая концепция машинного обучения // Стохастическая оптимизация в информатике. СПб. ГУ, 2013. Т. 9. Вып. 1. С. 128 - 143. <http://www.math.spbu.ru/user/gran/optstoch.htm>.
5. Шац В.Н. Индексный метод машинного обучения // Нейроинформатика-2014. XVI Всероссийская научно-техническая конференция. Сборник научных трудов. Ч. 2. М: НИЯУ МИФИ. 2014. С. 21-30.
6. Шац В.Н. Информация в самоорганизующейся системе. Новые концепции и методы машинного обучения. Саарбрюкен: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013. Р.105.
7. Пугачев В.С. Теория вероятностей и математическая статистика: Учеб. пособие. – 2-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2002. С. 496.
8. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. – 2nd ed. Springer-Verlag, 2009. P. 764.
9. Webb J.I., Boughton R.J., Wang Z. Not So Naive Bayes: Aggregating One-Dependence Estimators // Machine Learning, 2005. V. 58. P. 5–24
10. Джарратано Д., Райли Г. Экспертные системы: Принципы разработки и программирования. 4 -е изд.: Пер. с англ. М.: ИД «Вильямс», 2007. С. 1152
11. Asuncion A., Newman D.J. (2007). UCI Machine Learning Repository. Irvine CA: University of California, School of Information and Computer Science
12. Граничин О.Н., Поляк Б.Т. Рандомизированные алгоритмы оценивания и оптимизации при почти произвольных помехах. М.: Наука, 2003. С. 291

Л.Г. КОМАРЦОВА, Ю.Н. ЛАВРЕНКОВ

Калужский филиал МГТУ им. Н. Э. Баумана
lkomartsova@yandex.ru, georglawr@yandex.ru

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ АНАЛИЗА ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЕМЕНТОВ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ СВЯЗИ

В статье приводится описание алгоритма настройки параметров нейронной сети, построенной на основе сигма-пи нейронов. Ядро алгоритма обучения составляет комбинация алгоритмов случайного поиска с применением эвристического алгоритма. Применение комплексного подхода обучения для нейронных сетей позволяет выполнить обучение за время, необходимое для настройки нейронной сети на решение задачи. Рассмотрена возможность использования сигма-пи сети для оценки параметров канала передачи информации.

Ключевые слова: *сигма-пи нейронная сеть, алгоритмы случайного поиска, быстрое преобразование Фурье, компрессия данных.*

L.G. KOMARTSOVA, Y.N. LAVRENKOV
Bauman Moscow State Technical University Kaluga Branch

USE OF NEURAL NETWORKS FOR ANALYZING CHARACTERISTICS OF THE ELEMENTS OF THE TELECOMMUNICATION NETWORK

This article provides the description of the settings tuning algorithm for neural network built on the basis of sigma-pi neurons. The core of the learning algorithm is a combination of random search with the heuristic algorithm. An integrated approach to training neural networks allows one to perform training within the time range required to adjust the neural network to solve the problem. The possibility of using sigma-pi network to estimate the parameters of data transmission channel is considered.

Keywords: *Sigma-Pi neural network, algorithms for random search, fast Fourier transform, data compression.*

Введение

Для обеспечения работоспособности локальных вычислительных сетей применяется множество алгоритмов, основное назначение которых – организовать быструю и безопасную передачу цифровой информации по сетям связи [1]. К таким алгоритмам относятся методы построения маршрутов в сетях связи, реализация технологий коммутации для повышения пропускной способности сети. Исходными данными для работы приведённых алгоритмов является информация о среде передачи, в которой будет организовываться обмен информацией. С целью оперативного изменения поведения алгоритмов необходим способ постоянного информирования вычислительной системы о тех каналах связи, которые имеются в наличии и доступны для использования. Для кабельных линий таким способом служит ее зондирование и последующее оценивание [2]. Полученные данные могут быть использованы для построения безопасных маршрутов, надёжность которых характеризуется состоянием их кабельных линий. Для анализа канала применяется метод импульсной рефлектометрии, который требует дорогостоящих приборов для получения осциллограммы сигнала, отраженного от различных неоднородностей кабеля. Сложности возникают и при интерпретации полученных результатов.

В статье для анализа канала передачи информации предлагается использовать аппарат нейросетевых технологий в совокупности с методами

получения информации о канале связи на основе оценки изменения спектра зондирующего сигнала.

Гибридный алгоритм обучения нейронной сети

В основу подхода к интеллектуальному анализу данных положена сигма-пи нейронная сеть [3]. Выбор обоснован тем, что указанная сеть сочетает в себе положительные качества многослойных нейронных сетей (персептронов) и радиально-базисных нейронных сетей.

На рис. 1 приведена схема сигма-пи сети, где $\psi(\bullet)$ – сигмоидальные функции активации; $\varphi(\bullet)$ – радиально-базисные функции активации; a , b , w – настраиваемые весовые коэффициенты. Количество входов зависит от принципов формирования обучающей выборки (рассмотрено ниже). Нейросетевой эксперт обучается по принципу «победитель забирает всё» [4], количество решений, которое может принимать нейронная сеть (НС), соответствует числу нейронов в выходном слое. Каждому выходному нейрону сети сопоставляется степень надёжности и безопасности анализируемого канала. После того как сеть примет решение, производится поиск нейрона с максимальным значением выходного сигнала («нейрон-победитель»), и система выдаёт решение, соответствующее найденному нейрону. Этот способ функционирования сети требует продолжительного времени обучения и настройки, но выдаваемые решения проще интерпретировать.

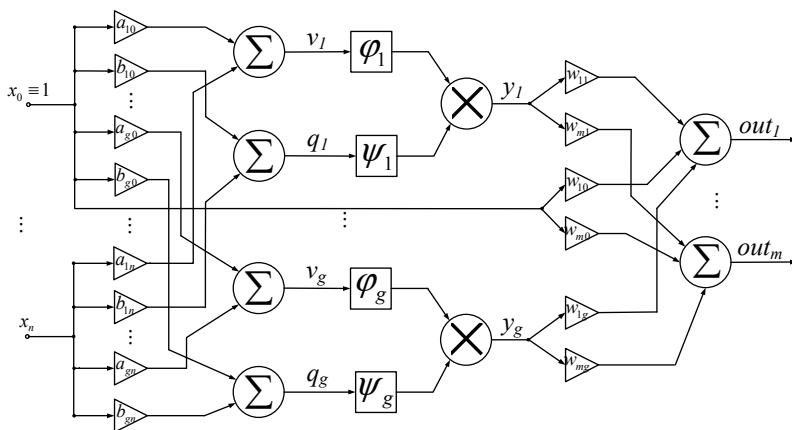


Рис. 1. Структурный граф сигма-пи сети

Как видно из структурного графа сигма-пи сети, для настройки данной системы требуется оптимизация большого количества параметров: групп весов для сигмоидальных и радиально-базисных частей нейронов, параметров функций активации, весовых коэффициентов выходного слоя. Обучение рассматриваемой сети можно осуществить путём задания целевой функции в виде [4]:

$$E(t) = \frac{1}{2} e^2(t) = \frac{1}{2} (d(t) - y(t))^2, \quad (1)$$

где $d(t)$ – вектор ожидаемых значений, $y(t)$ – вектор полученных значений, t – время работы системы. Сигма-пи сеть отвечает за принятие решения, от которого зависит дальнейшее функционирование телекоммуникационной сети связи, и её структура может значительно варьироваться в зависимости от решаемой задачи. При большой размерности входного пространства вычисление коэффициентов коррекции настраиваемых параметров на основе градиентных методов может занимать значительное время.

В работе предлагается выполнить обучение сигма-пи сети на основе комбинации алгоритмов случайного поиска:

1. Первый этап обучения начинается с инициализации настраиваемых параметров случайными значениями из интервала $(0, 1)$.

2. Второй этап оптимизации начинается с установки всех параметров, кроме весовых коэффициентов a и b . Из всех значений весовых коэффициентов a и b составляется два вектора, которые подвергаются оптимизации с целью минимизации критерия ошибки E (1). Для адаптации данных параметров применялся алгоритм оптимизации с парными пробами [3], который в процессе своей работы генерирует два вектора $a(k) \pm \mu r(k)$ и $b(k) \pm \mu r(k)$, где $r(k)$ – случайный вектор, определяющий направление поиска, k – номер итерации, μ – коэффициент, определяющий скорость работы алгоритма. После вычисления проб рабочий шаг алгоритма делается в направлении наименьшего значения полученной ошибки:

$$\begin{aligned} a(k+1) &= a(k) - \eta r(k) \text{sign}(E(a(k) + \mu r(k)) - E(a(k) - \mu r(k))), \\ b(k+1) &= b(k) - \eta r(k) \text{sign}(E(b(k) + \mu r(k)) - E(b(k) - \mu r(k))), \end{aligned} \quad (2)$$

где η – коэффициент скорости обучения, $\text{sign}()$ – функция, возвращающая знак своего аргумента. Характерной особенностью данного алгоритма является тенденция к поиску нового решения, даже в том случае, когда приемлемое решение найдено.

3. Производится настройка весовых коэффициентов выходного слоя с помощью алгоритма пересчёта параметров при неудачном шаге [5]. Из

всех значений весовых коэффициентов w формируется вектор, параметры которого далее оптимизируются в соответствии со следующей зависимостью:

$$w(k+1) = w(k) + \begin{cases} \eta r(k), & \text{if } E(k+1) < E(k), \\ -\eta r(k-1) + \eta r(k), & \text{if } E(k+1) \geq E(k). \end{cases} \quad (3)$$

4. В качестве сигмоидальных и радиально-базисных функций активации были выбраны следующие:

$$\psi(x) = \frac{1}{1 + e^{-\gamma x}}; \quad \phi(x) = \frac{1}{(\|x - c\|^2 + \sigma^2)^{\frac{1}{2}}}, \quad (4)$$

где c – центр радиально-базисной функции, σ – параметр ширины, γ – параметр крутизны сигмоидальной функции. Необходимо оптимизировать три параметра каждого сигма-пи нейрона: γ , c , σ . Из параметров одного типа формируется вектор для оптимизации и выполняется настройка НС с помощью алгоритма наилучшей пробы [2]: Из исходного вектора параметров генерируется h случайных векторов для каждого оптимизируемого параметра:

$$\begin{aligned} & c + \eta r^1(k), c + \eta r^2(k), \dots, c + \eta r^h(k); \\ & \sigma + \eta r^1(k), \sigma + \eta r^2(k), \dots, \sigma + \eta r^h(k); \\ & \gamma + \eta r^1(k), \gamma + \eta r^2(k), \dots, \gamma + \eta r^h(k). \end{aligned} \quad (5)$$

Выполняя данную последовательность этапов, проводим обучение сети до получения заданной минимальной ошибки.

Для ускорения процедуры обучения авторами был разработан эвристический алгоритм. Применение эвристики производится через каждые 50 итераций (на одной итерации предъявляются все примеры обучающей выборки).

Эвристический алгоритм для перемещения поиска в другую точку пространства базируется на процедуре изменения состояния следующей геометрической модели:

1. В трёхмерном пространстве выполняется построение группы сфер (в данной задаче 24 сферы), центры которых расположены в точках, задаваемых случайным образом. Координаты центра по оси абсцисс и ординаты могут быть выбраны произвольно из заданного интервала, а значение координаты по оси аппликат полагается равным нулю. В данной работе используется интервал $(-17, 19)$ для координаты x и интервал $(-18, 18)$ для координаты y . Сферы в пространстве расположены так, что их оси вращения параллельны оси аппликат.

2. Строятся графики функций двух переменных:

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= (\cos(\alpha \cdot x + (1 - \alpha) \cdot y))^2; \\ F_2(x, y) &= \cos(2 + (1 - \beta) \cdot x - \beta \cdot y). \end{aligned} \quad (6)$$

Построение необходимо выполнить таким образом, чтобы все построенные сферы оказались между двумя поверхностями этих двух функций:

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= (\cos(\alpha \cdot x + (1 - \alpha) \cdot y))^2 - 10; \\ F_2(x, y) &= 10 + \cos(2 + (1 - \beta) \cdot x - \beta \cdot y). \end{aligned} \quad (7)$$

После преобразования уравнений (6) в (7) поверхность функции F_1 будет находиться на уровне $z = -10$, а поверхность функции F_2 на уровне $z = +10$. Параметры α и β определяют поведение функции, и для поддержания процесса оптимизации необходимо постоянное изменение заданных значений.

3. В каждой сфере на уровне большого круга, размещённого перпендикулярно оси аппликата, выделяются 9 точек: (x_c, y_c) , $(x_c + r, y_c)$, $(x_c - r, y_c)$, $(x_c, y_c + r)$, $(x_c, y_c - r)$, $(x_c + r/2, y_c)$, $(x_c - r/2, y_c)$, $(x_c, y_c + r/2)$, $(x_c, y_c - r/2)$, где x_c – значение координаты центра по оси абсцисс, а y_c – значение координаты центра по оси ординат, r – радиус сферы.

4. На верхнюю полусферу каждой сферы оказывает влияние функция F_2 , а на нижнюю – F_1 . Степень данного влияния для каждой сферы с координатами центра в точке (x_c, y_c) вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} Infl_F_2 &= F_2(x_c, y_c) + F_2(x_c + r, y_c) + F_2(x_c - r, y_c) + F_2(x_c, y_c + r) + \\ &+ F_2(x_c, y_c - r) + F_2(x_c + r/2, y_c) + F_2(x_c - r/2, y_c) + F_2(x_c, y_c + r/2) + \\ &+ F_2(x_c, y_c - r/2); \\ Infl_F_1 &= F_1(x_c, y_c) + F_1(x_c + r, y_c) + F_1(x_c - r, y_c) + F_1(x_c, y_c + r) + \\ &+ F_1(x_c, y_c - r) + F_1(x_c + r/2, y_c) + F_1(x_c - r/2, y_c) + F_1(x_c, y_c + r/2) + \\ &+ F_1(x_c, y_c - r/2). \end{aligned}$$

Величина $Infl_F_2$ характеризует степень влияния функции F_2 на верхнюю полусферу каждой сферы, $Infl_F_1$ – степень влияния F_1 на нижнюю полусферу каждой сферы.

5. На основании полученных оценок сил взаимодействия сферы и двух поверхностей функций осуществляется поворот каждой сферы на определенный угол относительно оси абсцисс. Угол поворота вычисляется следующим образом:

$$\Theta = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{abs(Infl_F_1 + Infl_F_2)}{mx}, \quad (8)$$

где mx – максимальное значение функции $abs(Infl_F_1 + Infl_F_2)$ при установленных параметрах α и β . Для вычисления этого значения после оп-

ределения параметров функций $Infl_{F_2}$ и $Infl_{F_1}$ необходимо провести исследование данных функций на заданных интервалах по оси абсцисс и ординат с целью выявления максимального значения модуля их суммы.

6. Поворот каждой сферы возможен на угол $\pi/2$ радиан. Переход к новым точкам в поисковом пространстве требует замены значения угла поворота сферы в радианах из промежутка $[0, \pi/2]$ числом из промежутка $[0, 255]$. Это число находится как целая часть частного от деления величины угла в радианах на число $\pi / 2 \cdot 1 / 256 = 0,006135923$.

7. Результат работы алгоритма представлен 24 значениями, которые представляются 24 байтами и характеризуют текущее состояние построенной геометрической модели. После нормализации все 24 числа будут лежать в интервале от 0 до 1. Случайным образом выбираем 24 параметра сигма-пи сети и заменяем сгенерированными. Если требуются более радикальные изменения, то необходимо увеличить количество сфер в модели.

Оценка эффективности разработанного алгоритма оптимизации проводилась на основе сравнения результатов работы в одинаковых экспериментальных условиях с генетическим алгоритмом (ГА) оптимизации [4], структура хромосомы которого определяла возможные параметры сигма-пи сети. Такой способ представления хромосомы позволяет использовать стандартные генетические операторы и операторы мутации для поиска нужного решения. Сравнение разработанного алгоритма оптимизации на основе модели переходов в пространстве состояний, базирующейся на разработанной эвристике, и генетического алгоритма проводилось на основе анализа возможностей этих алгоритмов уменьшить ошибку обучения НС на величину равную 25%. Тестирование алгоритмов осуществлялось на одной и той же нейронной сети, но при этом производилось увеличение количества входных переменных путем задания дополнительных компонентов сети.

На рис. 2 приводится зависимость, которая показывает, как изменяются относительные затраты времени, необходимые для улучшения первоначального решения на 25 %, т.е. уменьшения ошибки настраиваемой модели. На рис. 2 по оси абсцисс ведётся отсчёт количества переменных, участвующих в оптимизации, а по оси ординат – время в относительных единицах. Относительный отсчёт времени вводится для устранения зависимости алгоритма от конкретной вычислительной платформы [5]. В качестве значения времени, принимаемого за единицу, выбирается максимальное время работы одного из оптимизационных алгоритмов. При увеличении числа переменных увеличивается длина хромосом ГА, что приводит к усложнению операторов мутации, скрещивания и селекции. В результате решения данной задачи алгоритм оптимизации сигма-пи сети,

основанный на комбинации алгоритмов случайного поиска с эвристикой для получения новых решений, показал эффективность большую, чем ГА.

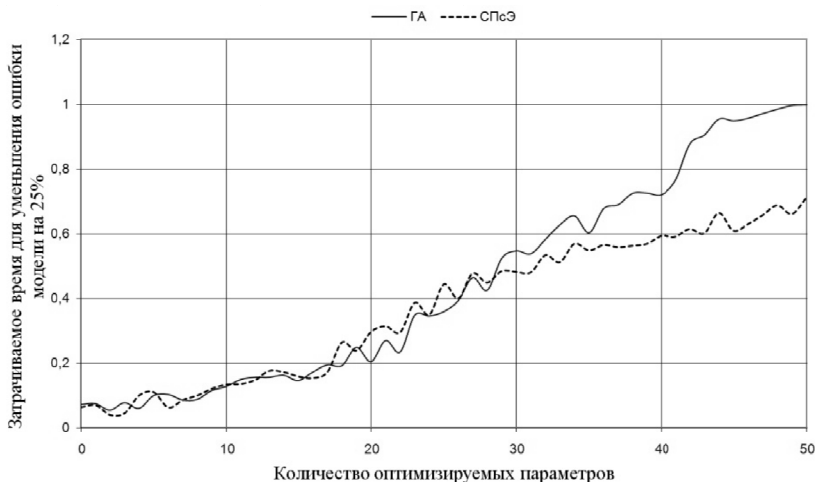


Рис. 2. Сравнение ГА и случайного поиска с эвристикой (СПсЭ)

Рассмотрим применение данной нейронной сети для решения задачи оценки параметров безопасности канала передачи информации.

Выполнение анализа канала передачи информации

Для анализа состояния кабельных линий связи чаще всего применяют рефлектометр – прибор, функционирующий по тем же принципам, что и радар [2]. Рефлектометр, подключенный к исследуемому кабелю, посылает последовательность импульсов в кабель связи и получает отражённый сигнал. Импульс отражается от различных неоднородностей канала связи, скруток, несанкционированных подключений. По отражённому сигналу можно оценить состояние кабельной системы в целом. Существенным недостатком данного метода является высокая стоимость устройств такого типа. В качестве основного механизма для анализа канала связи предлагается использовать рассмотренную выше нейросетевую структуру в совокупности с разработанной схемой анализа канала передачи. Основной проблемой является вопрос формирования обучающей выборки для данной структуры, чтобы в дальнейшем она могла взять на себя функции по

анализу состояния канала связи. Для формирования числовых последовательностей, характеризующих состояние канала связи, авторами предлагается следующий алгоритм.

1. В качестве зондирующего импульса используется единичный импульс от генератора, выполненного на микросхеме интегрального *ICL8038*. Изменяя параметры внешних компонентов генератора, задаётся необходимый период отправки сигнала.

2. Сгенерированный прямоугольный импульс поступает в канал передачи.

3. На следующем этапе работы устройства необходимо вернуть энергию пришедшего импульса обратно. Это удобно для анализа линии связи, так как устраняется необходимость в генерации зондирующих импульсов на одной стороне канала передачи и измерениях на другой. Возврат энергии импульса осуществляется с помощью колебательного контура.

4. По завершении процедуры быстрого преобразования Фурье (БПФ) над отсчётами отражённого сигнала, формируется обучающая выборка для нейронной сети (рис. 3), которая содержит 1400 значений спектра сигнала.

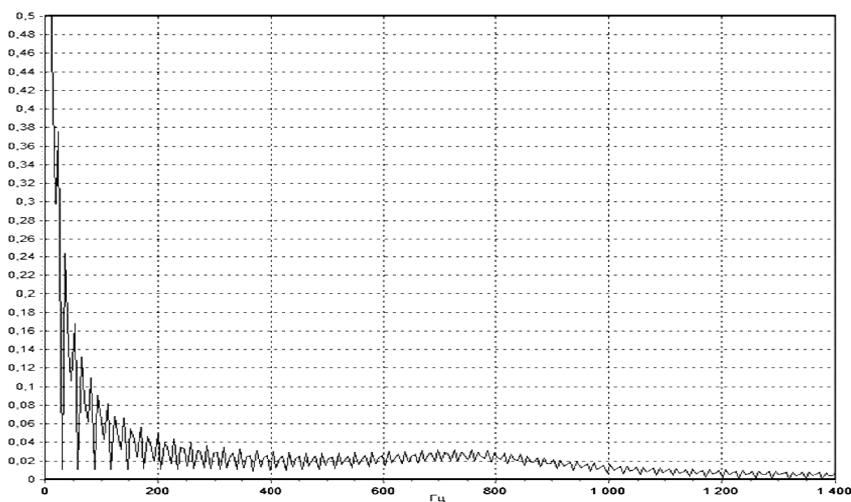


Рис. 3. Результат выполнения ДПФ для сигнала с эталонного канала связи

В результате, для анализа состояния канала передачи производится оценка 1400 значений спектра сигнала (см. рис. 3). Поскольку входной

вектор такой размерности приводит к значительному усложнению архитектуры нейросетевого эксперта, анализирующего вектор входного сигнала, перед подачей на вход сети вектор необходимо сжать [4].

В качестве основного базового компонента алгоритма сжатия данных применялся модифицированный нейрон N – адалина [3] (рис. 4). В данном нейроне блоки выполняют следующие преобразования сигналов: $\sin - \sin(\pi \cdot x) \cdot \sin(\pi \cdot y)$, $\cos - \cos(\pi \cdot x) \cdot \cos(\pi \cdot y)$, $\tanh - \tanh(x) \cdot \tanh(y)$.

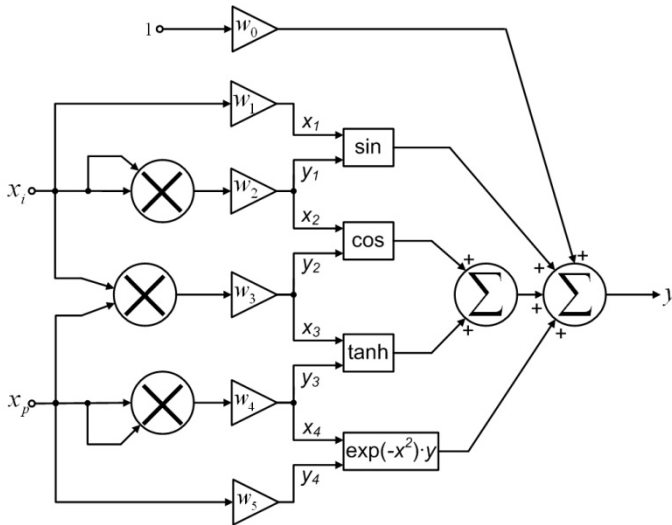


Рис. 4. Базовая нейросетевая структура алгоритма сжатия данных

Так как базовая структура имеет два входа, то первый слой состоит из 2100 элементов. Последующие слои обладают только одним информационным выводом, и если предыдущий слой содержит нечётное количество элементов, то значение сигнала с последнего вывода игнорируется. На основе данных принципов выполняется построение всей нейросетевой структуры для сжатия данных. Полученная сеть будет иметь 7 слоёв с размерностями 1400, 2100, 1050, 524, 262, 130, 64, 32.

Таким образом, вектор исходных данных преобразуется в вектор из 32 значений. Для проверки способности данной нейросетевой структуры адекватно реагировать на изменения в исходном векторе производился анализ реакции системы на изменение значения на величину сотой доли в одной компоненте данных (всего 1400). Эксперименты показали, что такие незначительные изменения входного вектора приводят к изменениям

в среднем трех компонентов 32-разрядного выходного вектора. Это позволяет нейросетевому эксперту адекватно реагировать даже на малейшие изменения векторов, характеризующих канал передачи информации.

Заключение

В работе исследован комбинированный алгоритм обучения сигма-пи нейронной сети на основе комплекса алгоритмов случайного поиска. В алгоритме применяется эвристика на основе изменения состояния геометрической системы.

Выявленное увеличение эффективности обучения сигма-пи нейронной сети, составившее в среднем 35% по сравнению с генетическим алгоритмом, доказывает преимущество гибридных стратегий обучения перед стандартными эволюционными алгоритмами обучения нейронных сетей.

Эксперименты с изменением физической среды передачи информации, в качестве которой в экспериментах применялся кабель *BW7711*, показали, что разработанная система позволяет оперативно снижать уровень доверия к каналу передачи информации в случае подключения отводов, попыток изменения длины кабеля и замыкания отдельных жил.

Результаты работы позволяют заключить, что сигма-пи сеть может быть использована для оценки параметров физической среды передачи, а полученные на ее основе данные могут применяться в алгоритмах, для работы которых необходима информация подобного типа: алгоритмах маршрутизации, коммутации и обнаружения вторжений.

Список литературы

1. Олифер В.Г., Олифер Н.А. Компьютерные сети. Принципы, технологии, протоколы: Учебник для вузов. 4-е изд. СПб.: Питер, 2011.
2. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники: Пер. с англ. – 7-е изд. М.: Мир, БИНОМ, 2011.
3. Бодянский Е.В., Руденко О.Г. Искусственные нейронные сети: архитектуры, обучение, применения. Харьков: ТЕЛІЕТЕХ, 2004.
4. Комарцова Л.Г., Максимов А.В. Нейрокомпьютеры: Учебное пособие для вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004.
5. Червяков Н.И., Евдокимов А.А., Галушкин А.И., Лавриненко И.Н., Лавриненко А.В. Применение искусственный нейронных сетей и системы остаточных классов в криптографии. М.: Физматлит, 2012.

В.Н. БОНДАРЕВ

Севастопольский национальный технический университет
vbondarev00@mail.ru

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВОЙ МОДЕЛИ ИМПУЛЬСНОГО НЕЙРОНА ДЛЯ АДАПТИВНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ СИГНАЛОВ

Рассматривается модель многовходового импульсного нейронного элемента, ориентированная на решение задач цифровой обработки сигналов. Предлагается дискретное выражение для вычисления состояния импульсного нейронного элемента и правило его обучения, основанное на критерии минимума среднеквадратической ошибки выделения полезного сигнала из смеси со стационарными аддитивными помехами.

Ключевые слова: *цифровая модель импульсного нейрона, адаптивная фильтрация сигналов, правило обучения.*

V.N. BONDAREV

Sevastopol National Technical University

APPLICATION OF DIGITAL MODEL OF PULSE NEURON FOR THE ADAPTIVE SIGNAL FILTRATION

The model of multi input pulse neural element focused on the solution of digital signal processing problems is considered. Discrete expression for calculation of the state of pulse neural element and the learning rule based on criterion of a mean square error minimum of useful signal extraction from the mix with stationary additive noise is proposed.

Keywords: *digital model of pulse neuron, adaptive signal filtration, learning rule.*

Введение

Известны различные модели нейронных сетей (НС), которые широко применяются в задачах цифровой обработки сигналов, например, при обработке биомедицинских сигналов, предсказании временных рядов, обработке речи, обработке изображений, слепом разделении сигналов и др. [1, 2] В последние годы интенсивно разрабатываются модели импульсных нейронных сетей, которые рассматриваются в качестве возможной пара-

дигмы вычислений [3]. Основу таких сетей составляют различные модели биологических нейронов, реагирующих на входные воздействия последовательностью выходных импульсов (спайков). Анализ взаимосвязи импульсных нейронных сетей и алгоритмов обработки сигналов является важной задачей в области разработки обучающихся интеллектуальных систем [3].

Модели импульсных нейронов исследовались во многих работах, например [3–5]. Упрощенное представление процесса функционирования таких нейронов сводится к суммированию постсинаптических потенциалов, порождаемых входными импульсными последовательностями, и формированию выходных импульсов, если потенциал мембраны нейрона превосходит некоторый порог. В этом смысле динамика импульсных нейронных сетей соответствует процессам, протекающим в системах с частотно-импульсной модуляцией [6, 7]. Применение импульсных моделей нейронов для различных задач обработки сигналов рассматривалось в работах [8–10]. В [11–15] рассмотрено применение частотно-импульсных нейронных моделей для решения задач идентификации, спектрального анализа, рекурсивной и нерекурсивной фильтрации. В работе [4] предлагается модель вычислений для импульсных нейронных сетей, основанная на понятии «жидкостных» состояний, и указывается на её взаимосвязь с вычислениями при адаптивной обработке сигналов. При этом анализируются потенциальные возможности такой модели вычислений без указания каких-либо конкретных вариантов её применения для обработки сигналов.

К нерешенным частям этой проблемы относится отсутствие модели импульсного нейронного элемента (ИНЭ) со многими входами, ориентированной на решение практических задач адаптивной обработки сигналов.

Целью статьи является разработка цифровой модели многовходового импульсного нейрона для адаптивного выделения полезного сигнала из аддитивной смеси с шумом.

Постановка задачи и разработка моделей ИНЭ

Рассмотрим модель многовходового импульсного нейрона, изображенную на рис. 1, как обобщение модели частотно-импульсного преобразователя с одним входом [6, 7]. Будем полагать, что на входы модели поступают частотно-импульсные последовательности $u_i(t)$, которые в каждом входном канале взвешиваются с весами w_i и обрабатываются линейными фильтрами с импульсными характеристиками $h_i(t)$. Реакции фильтров суммируются, и если модуль их суммы $s(t)$ превышает порог, то пороговое устройство (ПУ) формирует выходной импульс. Этот импульс об-

нуляет (сбрасывает) переменные состояний фильтров, и процесс повторяется. Поскольку реакции фильтров моделируют возбуждающие (положительные) и тормозящие (отрицательные) постсинаптические потенциалы реальных нейронов, то входные частотно-импульсные последовательности будем рассматривать как биполярные, т.е. с учетом знака. Кроме этого, чтобы исключить необходимость дальнейшей демодуляции выходной импульсной последовательности, ограничимся рассмотрением случая отсутствия сброса в ИНЭ, и в качестве выхода будем рассматривать $s(t)$.

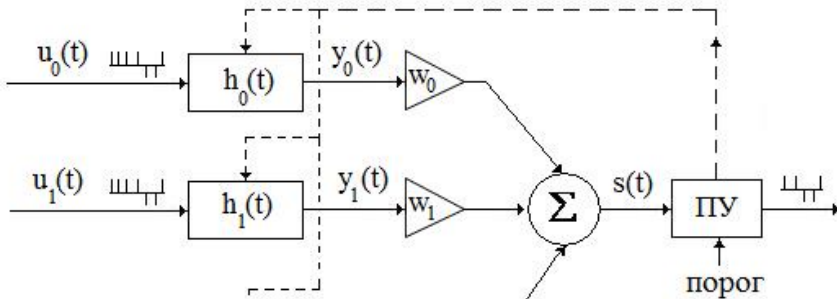


Рис. 1. Импульсный нейрон

Полагая, что входные частотно-импульсные последовательности формируются аналогичными импульсными нейронами, представим $u_i(t)$ в виде [7]:

$$u_i(t) = 1 / g_i \sum_j \lambda_i^j \delta(t - t_i^j), \quad t_i^j \leq t, \quad (1)$$

где t – текущее время; $\delta(t)$ – дельта-функция Дирака; t_i^j – момент времени, соответствующий появлению j -го импульса на i -м входе со знаком $\lambda_i^j = \pm 1$; $1 / g_i$ – порог нейрона, связанного с i -м входом. С учетом того, что поведение фильтров при нулевых начальных условиях определяется интегралом свертки, реакция каждого из фильтров на входное воздействие (1) может быть записана в виде [7]

$$y_i(t) = 1 / g_i \sum_j \lambda_i^j h_i(t - t_i^j), \quad (2)$$

где $h_i(t)$ – импульсные характеристики, характеризующиеся конечной длительностью T , $t-T \leq t_i^j \leq t$. Формула (2) представляет собой свертку входного сигнала $u_i(t)$, который представлен последовательностью δ -импульсов, с импульсной характеристикой $h_i(t)$ и, по сути, является уравнением частотно-импульсного нерекурсивного фильтра [7, 11]. Внутреннее состояние $s(t)$ импульсного нейрона определится из соотношения:

$$s(t) = \sum_{i=0}^{I-1} w_i y_i(t) , \quad (3)$$

где I – число входов ИНЭ; w_i – весовой коэффициент i -го входа.

Для вычисления значений $s(t)$ с помощью цифровых вычислителей необходимо выполнить дискретизацию (3) по времени. Пусть значения $s(t)$ вычисляются в дискретные моменты времени $t_n = n\Delta t$, где Δt – шаг дискретизации по времени. Найдем соответствующее дискретное выражение для вычисления реакции фильтров $y_i(t_n)$. При этом будем учитывать, что в соответствии с (2) $y_i(t)$ представляет сумму выборок из соответствующей импульсной характеристики в моменты поступления входных импульсов.

Так как в этом случае входные импульсы могут появляться только в дискретные моменты времени, то введем в рассмотрение битовые векторы $\mathbf{b}_i^T$, элементы которых равны либо 0, либо ± 1 (если в соответствующий временной слот, длительностью Δt , попадает входной импульс):

$$b_i(k) = \begin{cases} \lambda_i^j, & \text{если } t_n - (k+1)\Delta t \leq t_i^j < t_n - k\Delta t, \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases}$$

где $k = 0, 1, \dots, K-1$ и $K = \lceil T / \Delta t \rceil$. Тогда реакция каждого из фильтров на входную импульсную последовательность в дискретные моменты времени запишется в виде

$$y_i(t_n) = y_i[n] = 1 / g_i \mathbf{b}_i^T \mathbf{h}_i$$

и

$$s(t_n) = s[n] = \sum_{i=0}^{I-1} w_i / g_i \mathbf{b}_i^T \mathbf{h}_i , \quad (4)$$

где $\mathbf{h}_i = (h_i(0), h_i(1), \dots, h_i(K-1))$ – вектор отсчетов i -й импульсной характеристики. Следуя терминологии, принятой в [6], выражение (4) представляет цифровую модель многовходового ИНЭ и позволяет вычислять мембранный потенциал импульсного нейрона в равноотстоящие моменты времени, а также демодулировать импульсные сигналы $u_i(t)$ и выполнять различные виды их обработки.

Рассмотрим применение модели ИНЭ (4) для адаптивной фильтрации помех в соответствии с общей схемой, изображенной на рис. 2. На схеме адаптивный фильтр (АФ) реализован в виде последовательного соединения частотно-импульсного преобразователя (ЧИП) и ИНЭ. Предположим, что на вход АФ подаётся воздействие

$$u(t) = x(t) + \xi(t),$$

где $x(t)$ – полезный сигнал; $\xi(t)$ – случайная стационарная помеха, некоррелированная с $x(t)$. ЧИП преобразует $u(t)$ в последовательность импульсов (1), которая поступает одновременно на все входы ИНЭ. Также будем полагать, что выход ИНЭ представлен сигналом $s(t)$, соответствующим (3). Эталонный фильтр определяет желаемый линейный оператор преобразования полезного сигнала.

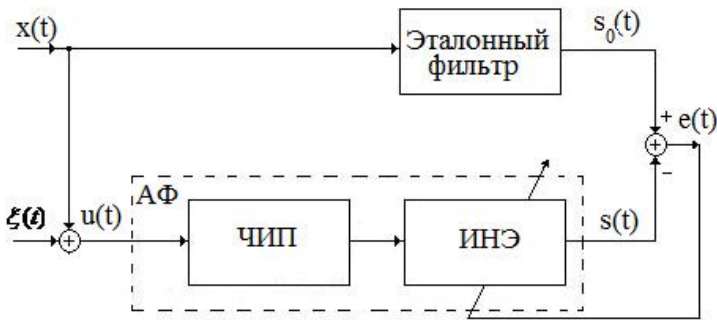


Рис. 2. Адаптивный фильтр на основе ИНЭ

Задача заключается в адаптивной настройке вектора весовых коэффициентов ИНЭ $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \dots, w_{I-1})$, обеспечивающего минимум функционала

$$J(\mathbf{w}) = E\{[s_0(t) - s(t)]^2\}, \quad (5)$$

где E – математическое ожидание; $s_0(t)$ – выходной сигнал эталонного фильтра.

Применяя метод нисходящего градиента из (5), (3) и (2), получаем выражение для нахождения значений вектора $\mathbf{w}$

$$\frac{d\mathbf{w}(t)}{dt} = -\mu(t) \frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \mu(t) E\{e(t)\mathbf{y}(t)\}, \quad (6)$$

где $\mathbf{y}(t) = (y_0(t), y_1(t), \dots, y_{I-1}(t))$ – вектор реакций фильтров; $\mu(t)$ – коэффициент скорости адаптации; $e(t) = s_0(t) - s(t)$ – ошибка. Получим дискретный аналог (6) для цифровой модели ИНЭ, заданной в виде (4).

Пусть импульсные характеристики каждого из каналов ИНЭ одинаковы, но сдвинуты на время $i \Delta t$, т.е. $h_i(k) = h(k-i)$. Тогда, учитывая, что все входные битовые векторы ИНЭ одинаковы, перепишем (4) в развернутой форме

$$s[n] = \sum_{i=0}^{I-1} w_i / g \sum_{k=0}^{K-1} b(n-k) h(k-i) = \sum_{i=0}^{I-1} w_i / g \sum_{k=0}^{K-1} b((n-i)-k) h(k), \quad (7)$$

где $1/g$ – порог преобразования ЧИП. Внутренняя сумма в выражении (7), представляющая свертку элементов смещенного во времени битового вектора с импульсной характеристикой, соответствует выходной реакции фильтра i -го канала ИНЭ, т.е.

$$y_i[n] = \sum_{k=0}^{K-1} b((n-i)-k) h(k).$$

Выполняя стохастическую аппроксимацию и дискретизацию (6), получаем

$$w_i[n] = w_i[n-1] + \mu[n] e[n] y_i[n]. \quad (8)$$

Выражение (8) представляет правило обучения цифровой модели ИНЭ, заданной в форме (7), в соответствии с критерием (5).

Результаты моделирования

Рассмотрим результаты моделирования АФ, построенного на основе цифровой модели ИНЭ (7). Параметры модели были следующими: $I=200$, $K=64$, $g=1000$, $\Delta t=0,001$. Импульсная характеристика соответствовала инерционному звену и определялась из выражения $h(t) = \exp(-0,05t)$. Полезный сигнал представлял собой гармоническое колебание $x(t) = \cos(2\pi f_0 t)$, $f_0=20$ Гц, а аддитивная помеха – белый шум с нормальным законом распределения и единичной дисперсией. Коэффициент передачи эталонного фильтра был равен 1. Так как в этом случае $s_0(t)=x(t)$, то задачей ИНЭ являлось восстановление (демодуляция) полезного сигнала из смеси с аддитивным шумом. Начальное значение коэффициента скорости обучения было равно 0,5 и уменьшалось пропорционально $1/\sqrt{n}$.

В качестве модели ЧИП использовалась модель интегрального биполярного частотно-импульсного модулятора, для которого моменты времени t^j , соответствующие появлению выходных импульсов, задаются рекуррентной формулой

$$t^j = t^{j-1} + \Theta_{j-1},$$

где Θ_{j-1} – интервал времени между импульсами, который определяется как наименьший корень уравнения

$$\Theta_{j-1} = \min \{ \Theta \mid \Theta > 0; |u(t^j)| \mid \Theta = 1/g \}.$$

Цифровая реализация такой модели является весьма простой и сводится к поиску такого значения Θ , при котором произведение $|u(t^j)| \mid \Theta$ становится равным порогу $1/g$. В этот момент на выходе модели ЧИП формируется импульс знак, которого определяется знаком входного сигнала $u(t^j)$.

На рис. 3 изображены отсчеты входного сигнала АФ $u[n]$, представляющего собой аддитивную смесь полезного сигнала и шума, отсчеты полезного $x[n]$ и выходного сигналов АФ $s[n]$ после обучения, а также полученные значения весовых коэффициентов ИНЭ.

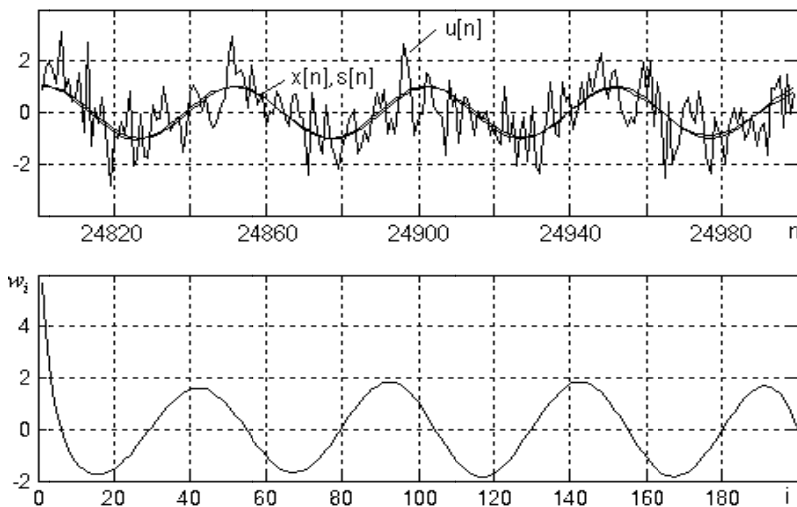


Рис. 3. Графики сигналов и значения весовых коэффициентов w_i

Как видно из результатов моделирования, фильтр после обучения достаточно хорошо выделяет полезный сигнал. Если отношение сигнал-шум для входного сигнала было равно -3 дБ, то для выходного оно составило 17 дБ, т.е. отношение сигнал-шум в результате фильтрации улучшилось на 20 дБ.

Выводы

Разработанные цифровые модели ИНЭ (4) и (7) являются общими и могут успешно использоваться не только для выделения полезного сигнала из аддитивной смеси с шумом. Например, эти модели и предложенное правило обучения (8) позволяют на основе ИНЭ строить алгоритмы синтеза нерекурсивных фильтров с заданными свойствами в соответствии с общим подходом, изложенным в [11, 15]. В этом случае прослеживается традиционная технология использования НС. На первом этапе осуществляется обучение ИНЭ с целью приближения его свойств к эталонному фильтру, а на втором этапе осуществляется применение обученного ИНЭ для решения поставленной задачи. При этом можно синтезировать фильтры как с прямоугольной формой амплитудно-частотной характеристики (АЧХ), так и фильтры со сложными (произвольными) формами АЧХ.

Так как в реалистичных импульсных нейронных сетях выход нейрона представляется в виде импульсной последовательности (спайков), то задачей дальнейших исследований в данном направлении можно считать разработку критериев и правил обучения с учетом этого обстоятельства, а также распространение предложенных моделей на задачи адаптивного распознавания образов.

Список литературы

1. Handbook of neural network signal processing / Yu Hen Hu, Jenq-Neng Hwang, editors. Boca Raton, Florida: CRC Press. 2002.
2. Бондарев В.Н., Аде Ф.Г. Искусственный интеллект. Севастополь: Изд-во СевНТУ. 2002.
3. Maass W. Paradigms for computing with spiking neurons // Models of Neural Networks. Early Vision and Attention / J.L. van Hemmen, J.D. Cowan, E. Domany, editors. New York: Springer. 2002. V. 4. P. 373–402.
4. Maass W. Liquid state machines: motivation, theory, and applications // Computability in Context: Computation and Logic in the Real World / B. Cooper and A. Sorbi, editors. London: Imperial College Press. 2010. P. 275–296.
5. Gerstner W. Population Dynamics of Spiking Neurons: Fast Transients, Asynchronous States, and Locking // Neural Computation. 2000. vol. 12. № 1. P. 43–89.
6. Попков Ю.С., Ашимов А.А., Асаубаев К.Ш. Статистическая теория автоматических систем с динамической частотно-импульсной модуляцией. М.: Наука. 1988.
7. Bondarev V.N. On system identification using pulse-frequency modulated signals. Eindhoven: Eindhoven University of Technology. 1988. Report 88-E-195. .
8. Natschlaeger T., Ruf B. Spatial and temporal pattern analysis via spiking neurons // Network: Computations in Neural Systems. 1998. V. 9. P. 319–332.

9. Ponulak F., Kasiński A. Introduction to spiking neural networks: Information processing, learning and applications // *Acta Neurobiol Exp.*? 2011. V. 71. № 4. P. 409–433.
10. Бодянский Е.В., Долотов А.И. Гетерогенная спайк-нейронная сеть с латеральными связями в задаче кластеризации // *Системы обработки информации*, 2007. Вип. 8 (66). С. 10–15.
11. Бондарев В.Н. Адаптивное частотно-импульсное моделирование в задачах цифровой обработки сигналов // *Вестник СевГТУ. Сборник научных трудов*. Севастополь, 1999. Вып.18. С. 46–51.
12. Бондарев В.Н. Исследование частотно-импульсного метода определения спектральных коэффициентов // *Сбірник наукових праць АВМС им. П.С. Нахімова*. Севастополь: АВМС им. П.С. Нахімова, 2006. Вип. 1(9). С. 121–125.
13. Бондарев В.Н. Идентификация линейных систем на основе частотно-импульсных моделей // *Вестник СевНТУ. Сборник научных трудов*. Севастополь, 2007. Вып.82. С. 81–85.
14. Бондарев В.Н. Синтез цифровых рекурсивных фильтров для сигналов, представленных частотой следования импульсов // *Вестник СевНТУ. Сборник научных трудов*. Севастополь, 2010. Вып. 101. С. 46–49.
15. Бондарев В.Н. Адаптивный синтез частотно-импульсных цифровых нерекурсивных фильтров // *Сбірник наукових праць АВМС им. П.С. Нахімова*. Севастополь: АВМС им. П.С. Нахімова, 2012. Вип. 4(12) . С. 80–85.

В.Е. ПАВЛОВСКИЙ¹, А.В. САВИЦКИЙ²

¹Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
vpavl@mail.ru, as@ttor.ru

НЕЙРОСЕТЕВОЙ КОНТРОЛЛЕР ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ КВАДРОКОПТЕРОМ

В работе построена теоретико-механическая модель мультироторного робота, квадрокоптера, учтено влияние силы сопротивления воздуха на движение аппарата. На основе результатов численного моделирования полета аппарата построен нейросетевой регулятор, представлены результаты его работы для вертикального взлета. Изучена работа регулятора в зависимости от погрешности датчика высоты.

Ключевые слова: *квадрокоптер, алгоритм управления, нейронная сеть, вертикальный взлет, погрешность датчика высоты.*

V.E. PAVLOVSKY¹, A.V. SAVITSKY²

¹*Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow*

²*Lomonosov Moscow State University*

THE NEURAL NETWORK CONTROLLER FOR QUADROCOPTER

In this work the theoretical-mechanical model of the multirotor robot – a quadrocopter taking into account the main aerodynamic effects is constructed. On the basis of results of numerical modeling of flight of the device the neural network regulator for basic trajectories is constructed. Operation of the regulator depending on height sensor error is studied.

Keywords: *quadrocopter, control algorithm, neural network, vertical take-off, height sensor error.*

Введение

В течение последних лет тема беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) получает все большее распространение. Особый интерес вызывают мультикоптерные роботы – устройства, приводимые в движение роторами (как правило, их количество – от 1 до 8). Случай одного ротора – это обычный вертолет, четырех – квадрокоптер – объект внимания данной работы [1-6].

Использование стандартных датчиков позиционирования (акселерометр, гироскоп) требует дополнительных исследований в связи с тем, что накапливаемая ошибка может значительно исказить выходную информацию. Поэтому большая часть всех публикаций посвящена различным алгоритмам построения управлений и сравнению их эффективности. Среди них можно выделить несколько групп:

метод построения управления, основанный на теории Ляпунова, позволяющий в определенной постановке достичь асимптотической устойчивости летательного аппарата [4];

алгоритм управления, в основе которого лежит пропорционально-интегрально-дифференциальный регулятор, его основное преимущество заключается в экспоненциальной сходимости, упрощенной реализации, так как не требует специфических параметров модели [3];

третья группа методов – энергетические методы, применимые для пассивных систем с недостатком управляющих воздействий [1];

четвертый метод основан на линейно-квадратичном регуляторе;

пятый основан на визуальном управлении от видеокамеры (видеокамер), часто используется на взлете-посадке;

шестой основан на управлении с помощью нейросетевого регулятора, используемого в задачах стабилизации, при поиске оптимальных параметров регулятора [5-6].

Целью настоящей работы является моделирование динамики мультироторного летательного аппарата, построение базовых нейроалгоритмов управления и изучение влияния погрешностей системы на действие нейросетевого контроллера. Одно из его назначений – преодоление проблемы дефицита управлений, так как квадрокоптер – это система с их недостатком, система имеет (в полете) 6 степеней свободы и только 4 управления, которыми являются скорости вращения винтов. Другая цель заключается в возможности реализации быстрых вычислений, так как нейросетевой метод относится к параллельным методам, работающим за малое число тактов вычислений.

Описание модели

В качестве модели квадрокоптера рассмотрим плоское твердое тело, состоящее из корпуса и четырех пропеллеров. Корпусом будем считать два перпендикулярных стержня длины $2l$, пересекающихся в центрах A . Центр масс квадрокоптера массы m находится в точке A . Четыре пропеллера закреплены в точках C_1, C_2, C_3, C_4 на расстоянии l от точки A .

Пусть $\{Oxyz\}$ – правая инерциальная система координат, причем Oz соответствует вертикальному направлению. Положение центра масс тела определяется вектором $\xi = (x, y, z)$. Пусть $\{Ae_1e_2e_3\}$ – правая система координат, жестко связанная с квадрокоптером. Выберем ось Oe_1 по направлению одной из "рук" летательного аппарата, ось Oe_2 – по направлению другой "руки".

Основные предположения

1. Из-за высокой угловой скорости лопастей несущих винтов будем рассматривать их как диски, а не как отдельные вращающиеся лопасти. Эти диски называются дисками несущего винта.

2. Будем рассматривать только умеренные маневры. Тем самым мы пренебрегаем упругостью лопастей несущего винта, а диск несущего винта считается бесконечно жестким и бесконечно тонким.

3. Подъемная сила каждого такого диска создает силу, которую назовем силой поступательного движения u_i , приложенную в точке C_i и все время направленную вдоль оси Oe_3 .

4. Управление ориентацией задается с помощью трех независимых вращающих моментов $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3\}$ вокруг каждой из трех осей системы координат $\{Ae_1e_2e_3\}$. Эти вращающие моменты приложены непосредственно к корпусу и не порождают никаких сил поступательного движения, связанных с вторичными аэродинамическими эффектами или упругостью лопастей несущих винтов.

5. Полагая, что линейная скорость квадрокоптера и его собственные вращения существенно меньше скорости вращения винтов, будем считать, что воздух оказывает сопротивление только на лопасти несущих винтов, создавая тем самым вращательные моменты трения.

6. Векторы угловых скоростей винтов, расположенных в точках C_1 и C_3 , сонаправлены вектору e_3 , другие два – противоположены.

Уравнения Лагранжа

Ориентация корпуса квадрокоптера задается с помощью трех углов Крылова $v = (\varphi, \psi, \theta)$. Кроме того, чтобы учесть динамику несущих винтов, введем скорости углов поворота лопастей $\dot{\gamma}_1, \dot{\gamma}_2, \dot{\gamma}_3$, и $\dot{\gamma}_4$. От них будут зависеть управляющие моменты. Таким образом, обобщенные координаты для квадрокоптера имеют вид: $q = (x, y, z, \varphi, \psi, \theta)$.

Обозначим I_A – момент инерции корпуса относительно точки A , выраженный в подвижной системе координат; Ω_A – угловая скорость корпуса в той же системе координат.

Кинетическая энергия поступательного движения и вращения корпуса квадрокоптера задаются формулами:

$$T_{trans} = \frac{m}{2}(\dot{\xi}, \dot{\xi}), \quad T_{rotA} = \frac{1}{2}(\Omega_A, I_A \Omega_A),$$

где $I_A = \text{diag}(I_1^A, I_2^A, I_3^A)$, причем в силу симметрии $I_1^A = I_2^A$.

В силу Предположения 2 угловая скорость лопастей в подвижной системе координат выражается формулой:

$$\Omega_{C_i} = \Omega_A + (-1)^{i+1} \dot{\gamma}_i e_3.$$

Предположим, что несущие винты в процессе собственного вращения образуют диск с центром масс в точке C_i и диагональным тензором инерции I_C в подвижной системе координат: $I_C = \text{diag}(I_1^C, I_2^C, I_3^C)$, причем в силу симметрии $I_1^C = I_2^C$.

Таким образом, суммарная кинетическая энергия квадрокоптера выглядит следующим образом:

$$T_{rotA} = \frac{1}{2}(\Omega_A, I_A \Omega_A) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 (\Omega_{C_i}, I_{C_i} \Omega_{C_i}) =$$

$$= \frac{1}{2}(\Omega_A, (I_A + 4I_C) \Omega_A) + \frac{1}{2} I_3^c (\dot{\gamma}_1^2 + \dot{\gamma}_2^2 + \dot{\gamma}_3^2 + \dot{\gamma}_4^2) +$$

$$+ (\dot{\gamma}_1 - \dot{\gamma}_2 + \dot{\gamma}_3 - \dot{\gamma}_4)(\Omega_A, I_C e_3).$$

Единственная потенциальная энергия, которая будет учтена – энергия силы тяжести: $U = mgz$.

Полная функция Лагранжа имеет вид:

$$L(q, \dot{q}) = T_{trans} + T_{rot} - U$$

В соответствии с Предположением 3 существуют четыре силы поступательного движения, и все они направлены вдоль оси e_3 . Следовательно, направление силы поступательного движения, приложенной к корпусу, определяется его ориентацией.

Также существуют три вращательных момента из Предположения 4, являющиеся управлениями.

В основу составления модели подъемной силы и момента несущего винта была положена работа [2], в которой изучен вертолет, установленный на экспериментальной платформе. Рассматривая малый элемент лопасти, имеем следующие выражения для аэродинамической силы и момента:

$$u_i = (-1)^{i+1} k_1 \dot{\gamma}_i, \text{ где } k_1 = \frac{\rho p c a V R^2}{4},$$

$$M_i = (-1)^i k_2 \dot{\gamma}_i^2, \text{ где } k_2 = \frac{\rho p c c_d a R^4}{8},$$

ρ – плотность воздуха, p – количество винтов, c – ширина лопасти, a – угловой коэффициент кривой подъема, R – радиус диска винта, V – индуцированная скорость парения, c_d – коэффициент сопротивления, M_i – момент сопротивления i -го винта.

Уравнения Лагранжа в общем виде (запись в координатах весьма громоздка, поэтому здесь мы ее опустим):

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = Q,$$

где Q – обобщенные силы, $A = I_1^a + 4I_1^c$, $D = I_3^a + 4I_3^c$, а

$$L(q, \dot{q}) = T_{trans} + T_{rot} - U = \frac{1}{2} A (\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \psi - 2\dot{\phi}\dot{\theta} \sin \psi +$$

$$+ \dot{\psi}^2 \cos^2 \theta + \dot{\phi}^2 \cos^2 \psi \sin^2 \theta + 2\dot{\phi}\dot{\psi} \cos \theta \sin \theta \cos \psi) +$$

$$+ \frac{1}{2} D (\dot{\psi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\phi}^2 \cos^2 \psi \cos^2 \theta - 2 \dot{\phi} \dot{\psi} \cos \theta \sin \theta \cos \psi) +$$

$$+ \frac{1}{2} I_2^c (\dot{\gamma}_1^2 + \dot{\gamma}_2^2 + \dot{\gamma}_3^2 + \dot{\gamma}_4^2) - I_3^c (\dot{\gamma}_1 - \dot{\gamma}_2 + \dot{\gamma}_3 - \dot{\gamma}_4) (\dot{\phi} \cos \psi \cos \theta - \dot{\psi} \sin \theta)$$

– функция Лагранжа.

Моделирование и алгоритмы управления

Численное интегрирование системы дифференциальных уравнений Лагранжа осуществлялось с помощью программы MATLAB R2013a. Был рассмотрен квадрокоптер массой 1 кг, с геометрическими параметрами $l = 0,4$ м, длина лопасти – 0,05 м, ширина – 0,01 м.

Взлёт-посадка и полет по прямой

В качестве одной из базовых траекторий рассмотрим вертикальный взлёт и посадку, в этом случае угловые скорости всех четырех винтов совпадают и равны ω . Выберем управление таким образом, чтобы $z(t)$ и $\omega(t)$ были гладкими непрерывными функциями. Результирующее решение приведено на рис. 1.

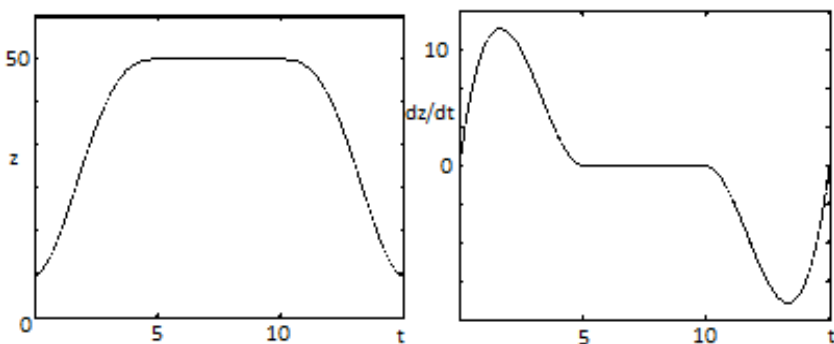


Рис. 1. График зависимости высоты и абсолютной скорости от времени при взлете-посадке

Для его реализации управление разделено на 3 этапа:
при $0 \leq t < 5$, $\omega(t)$ меняется по квадратичному закону, происходит набор высоты;

при $5 \leq t < 10$, $\omega = gm / 4k_1 = 37.73$ рад/с квадрокоптер зависает на высоте $h = 50$ м;

при $10 \leq t < 15$, $\omega(t)$ меняется по аналогичному квадратичному закону, происходит посадка.

Отметим, что на интервале $0 \leq t < 5$ координата $z(t)$ являлась функцией четвертой степени от t .

Рассматривались варианты отдельных взлета и посадки, а также осуществления полета по прямой при движении квадрокоптера в плоскости Oxy при фиксированном угле крена θ . Получены условия управления.

Нейросетевой контроллер

В задачах для систем с дефицитом управлений, некоторые из которых рассмотрены в книге [1], управление строится, исходя из свойств пассивности системы с использованием энергетического метода. В данном разделе исследуем нейросетевой метод синтеза управления. Он, в частности, позволяет преодолеть проблему указанного дефицита.

Ниже приведена схема синтеза управления с использованием нейросетевого контроллера, состоящая из трех основных функций: блока, моделирующего датчики, нейронной сети и интегратора.

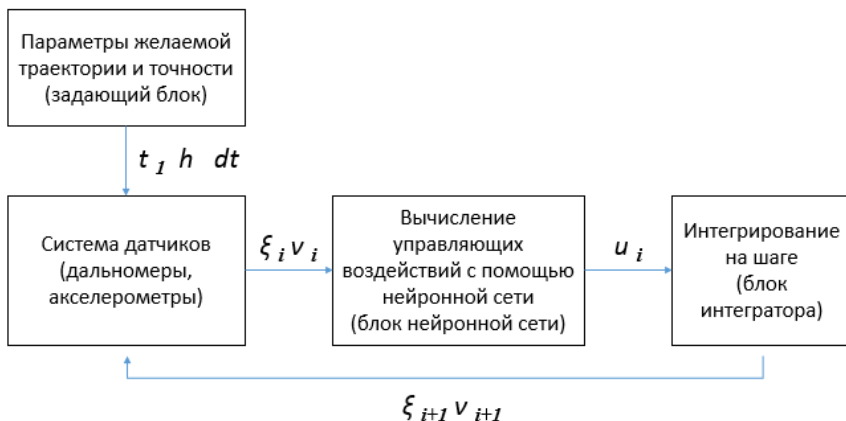


Рис. 2. Вычислительная схема

Блок нейронной сети (НС)

На основе численного моделирования следующим образом формируется обучающая выборка для НС. Для случая вертикального взлета с датчиком высоты (рассмотренного далее при моделировании) обучающей выборкой является множество четверок (строк) вида:

$$(T, h, z, u),$$

где T – время взлета, h – целевая высота, z – текущая высота и u – управляющее воздействие (сила вертикальной тяги). Первые три являются входными параметрами выборки, а последнее – выходом.

Далее в пространстве возможных движений сеть проходит обучение, после чего она используется для синтеза управлений. Подготовлены два основных варианта. В первом рассматривалось использование линейных датчиков положений и углов аппарата (по данным навигационной аппаратуры), во втором – датчиков ускорений по шести осям аппарата.

Во втором случае предполагается реализация композитной (гибридной) управляющей сети, изображенной на рис. 3. Первые пары блоков 1-6 этой сети образуют рекуррентную сеть типа сети Джордана для вычисления положений по ускорениям (фактически, для двойного интегрирования ускорений), завершающий 7-й блок, – это трехслойная сеть для окончательного расчета управлений. Отметим, этот случай является вторичным, перспективным вариантом.

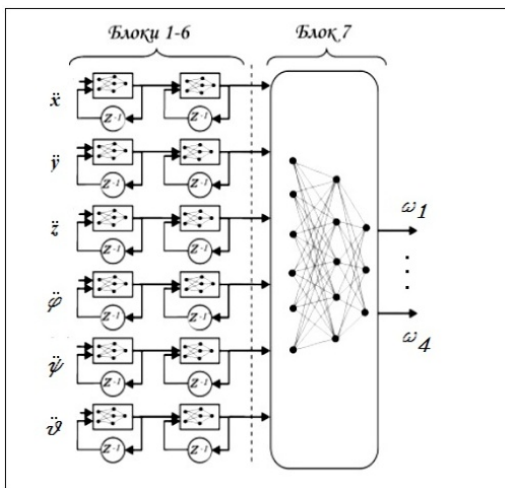


Рис. 3. Гибридная нейросеть для синтеза управлений

В данной работе рассмотрен первый вариант работы сети. Задачей этой функции является вычисление управляющих воздействий с помощью

нейронной сети в зависимости от текущих параметров системы и требуемой точности.

Блок интегратора

Данный блок интегрирует систему уравнений Лагранжа с учетом входящих параметров, в том числе управляющих воздействий. На выходе получается новое состояние системы, которое на следующем шаге цикла моделирования опять подается в нейронную сеть и т.д.

Вертикальный взлет

Случай вертикального взлета является одномерной задачей с переменной z . Система датчиков состоит из одного гибридного высотомера (предполагается, что для высоты от 0 до 1 м задействован ультразвуковой дальномерный датчик, а для высот более 1 м подключается барометрический). Он передает сигнал в блок нейронной сети с интервалом 0,01 с.

В качестве параметров желаемой траектории выберем желаемую высоту подъема (h) и время подъема (t_1). Для начала рассмотрим работу предложенного алгоритма для взлета на высоту 3 и 5 м за 3 с без учета погрешности высотомера (рис. 4).

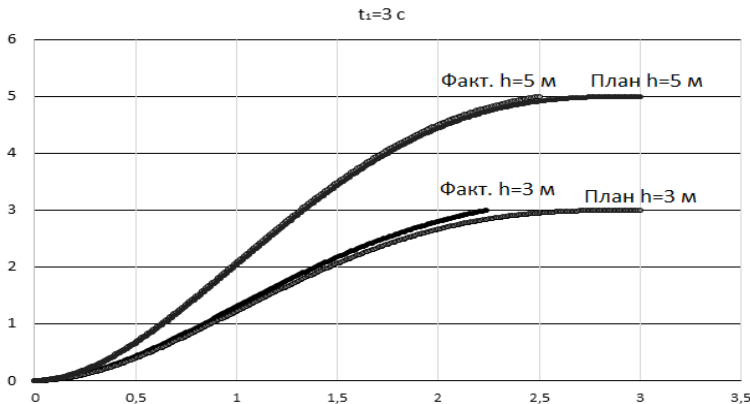


Рис. 4. Взлет на высоту 3 и 5 м с идеальными датчиками высоты

Графики, соответствующие работе регулятора, более краткие по времени в связи с тем, что при достижении целевой высоты алгоритм моделирования останавливается.

Погрешность системы для вертикального взлета

В системе была учтена погрешность измерения датчика высоты. Она вычислялась как случайное число, находившееся в определенном диапазоне. Ниже приведены графики аналогичных траекторий для случая погрешности 4 см.

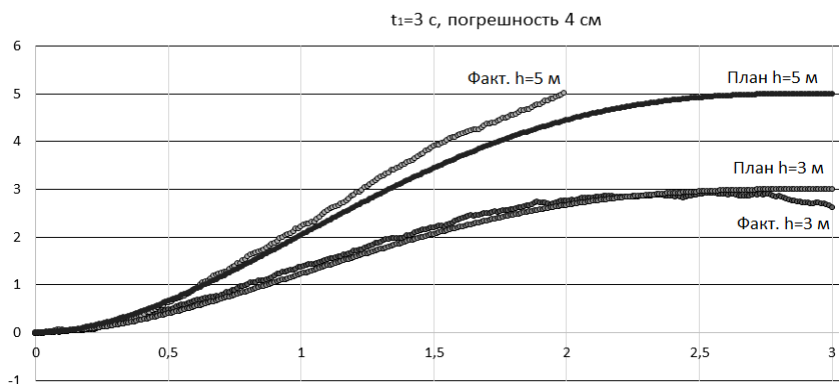


Рис. 5. Взлет на высоту 3 м и 5 м с датчиками с погрешностью 4 см



Рис. 6. Графики отклонения от траектории (м)

Выбор связан с тем, что на каждом шаге в среднем робот поднимается на 1 см, а погрешность в 5 см существенно превышает величину одного среднего шага. Ниже графически показана величина отклонения фактической траектории от планируемой в течение всего взлета.

В качестве показателей эффективности описанного регулятора рассмотрено среднеквадратичное отклонение полученной траектории от целевой, соответствующие значения представлены в таблице ниже.

Зависимость среднеквадратичного отклонения от погрешности датчика:

Погрешность высотомера (см)	1	2	4	6,6	10
Среднеквадратичное отклонение (см)	2,8	4,2	5,1	6,3	23,0

Полученная схема управления показывает связь между погрешностью датчиков и отклонением от целевого результата. По приведенным результатам моделирования было принято, что достаточными режимами являются варианты с погрешностью датчика, не превышающей 5 см.

Заключение

Построена модель квадрокоптера с четырьмя управлениями и шестью степенями свободы, учитывающая аэродинамические эффекты через воздействие воздуха на вращение лопастей винтов. С помощью численного моделирования рассматривались взлет-посадка и полет по прямой. Рассмотрено нейруправление коптером, рассмотрены случаи работы регулятора для взлета на заданную высоту с учетом погрешности датчика высоты и без нее.

В результате проведенного эксперимента по моделированию подтверждена возможность реализации нейроконтроллера управления квадрокоптером. Показано, что для рассмотренного конкретного варианта квадрокоптера (характерный размер порядка 1 м) нейрорегулятор удовлетворительно работает при точности датчиков высоты до 5 см. Полученный результат используется в модели реального коптера.

Список литературы

1. Фантони И., Лозано Р. Нелинейное управление механическими системами с дефицитом управляющих воздействий. М.-Ижевск: ООО "Компьютерная динамика", 2012.
2. Avila Vilchis J.C., Brogliato B., Dzule A., Lozano R., Nonlinear modelling and control of helicopters. // Automatica, 2003. 39.

3. Bresciani T., Modelling, Identification and Control of a Quadrotor Helicopter, Department of Automatic Control, Lund University, 2008.
4. Dzul P.A. and Lozano R. Real-time stabilization and tracking of a four-rotor mini rotorcraft.// IEEE Transaction on Control System Technology, 12(4):510 – 516, July 2004.
5. Евгенов А.А., Нейросетевой регулятор системы управления квадрокоптером. //Современные проблемы науки и образования, 2013. № 5.
6. Madani T., Benallegue A., Adaptive Control via Backstepping Technique and Neural Networks of a Quadrotor Helicopter // Proceedings of the 17th World Congress The International Federation of Automatic Control, Seoul, Korea, July 6-11, 2008.

Секция 4

Адаптивное поведение и эволюционное моделирование

В.Д. КОШУР

Сибирский федеральный университет, Красноярск
VKoshur@sfu-kras.ru

УСИЛЕНИЕ РОЕВОГО ИНТЕЛЛЕКТА В МЕТОДЕ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ЗА СЧЁТ НЕЙРО-НЕЧЁТКОГО УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ ПОИСКА

Представлена модификация метода роя частиц с повышенными адаптивными свойствами на основе введения в алгоритм поиска глобального минимума нейро-нечёткого управления для выбора составляющих движений агентов-частиц и усиления роевого интеллекта. Приведены результаты вычислительных экспериментов поиска глобального минимума для многоэкстремальных тестовых функций с двумя, пятьюдесятью и сотней переменных.

Ключевые слова: *метод роя частиц, мультиагентные системы, нечёткая логика, глобальная оптимизация.*

V. D. KOSHUR

Siberian Federal University, Krasnoyarsk

AMPLIFICATION OF SWARM INTELLIGENCE IN METHOD OF GLOBAL OPTIMIZATION BY USING FUZZY NEUREL NETWORK CONTROL FOR SEARCHING PROCESS

The updating of the Particles Swarm Optimization method with the increased adaptive properties is submitted. The introduction in algorithm of Global Optimization the Fussy Neuron Network for control of a choice of making movements of agents-particles and amplification of Swarm Intelligence is used. The results of computing experiments of search of a global minimum for multimodal test functions with two, fifty and hundred variable are given.

Keywords: *particles swarm optimization, swarm intelligence, multiagent systems, fuzzy logic, neural network, global optimization.*

Введение

Решение задач глобальной оптимизации (ГО) является одной из актуальных и широко востребованных задач вычислительной математики. В прикладных задачах целевая функция (ЦФ), как правило, имеет большое количество переменных, не задана в аналитической форме, а представляет собой «черный ящик», например, вычисляется как некоторая интегральная характеристика сложного динамического процесса, который необходимо оптимизировать. Разработка эффективных численных методов, адаптивных к изменению ЦФ, особенно актуальна в связи с развитием вычислительной техники и параллельных вычислительных систем.

В докладе представлены исследования, которые лежат в основе ряда разработок вычислительных алгоритмов ГО с повышенными адаптивными свойствами. Рассмотрены системы роевого интеллекта SI – Swarm Intelligence в виде мультиагентной системы (MAC), которая в определенной степени моделирует поведение стаи птиц при поиске корма.

В работах [1 – 4] и обзоре [5] рассмотрены основные подходы при создании численных методов решения задач ГО на базе роевого интеллекта, а также представлены модификации методов ГО на основе нечеткой логики, искусственных нейронных сетей и использования MAC. Направление искусственного интеллекта [6 – 8] представляет собой весьма широкий спектр знаний, методов и достигнутых результатов в различных областях исследований, одной из объединяющих концепций для которых является моделирование *рационального поведения агентов* – частиц в методах типа PSO – Particle Swarm Optimization. Особенно продуктивными оказываются алгоритмы, идеи которых заимствованы в природе и лежат в основе самоорганизации природных систем, кооперативного поведения простейших и сложных организмов без внешнего управления, объединяемых понятием *коллективного интеллекта*. В частности, *роевой интеллект* базируется на понятии популяции и моделирует характерные черты поведения стаи птиц или косяка рыб. Рой частиц или семейство нескольких роев частиц может рассматриваться как многоуровневая мультиагентная система [9, 10], в которой каждая частица-агент функционирует по простым правилам, но при этом важным является обмен информацией между агентами, что придает системе в целом новое качество «разумности».

Адаптивное нейро-нечёткое управление частицами-агентами

Роевой интеллект представляет собой коллективное поведение самоорганизующихся систем. Взаимодействующие элементы таких систем – это частицы-агенты, для которых определяется *функция агента* (отображение последовательности актов восприятия агента на некоторые его действия) и *программа агента* (внутреннее описание и конкретная реализация, действующая в рамках архитектуры агента). Важным аспектом при разработке таких систем является моделирование *рационального поведения агентов*, приоритетным является более полный обмен информацией между частицами-агентами, а также между агентами и средой, что и придает системе в целом новое качество «разумности». Для усиления роевого интеллекта проведено моделирование рационального поведения частиц-агентов на основе гибридизации классического метода частиц с методом усреднения координат и использование локализованных процедур Хука-Дживса [3], учета изменяемости ЦФ и оценок локальных констант Липшица и виртуализации нескольких роев частиц [2, 4].

В предлагаемой модификации PSO проведено добавление адаптивных свойств функциям частиц-агентов за счет встроенного нейро-нечёткого управления параметрами процесса поиска каждого агента-частицы.

Задача выбора показателей «производительности» частиц-агентов предполагает множественные реализации, в которых целесообразно учитывать как успешность работы каждой частицы-агента, так и роя в целом. При выделении показателя изменяемости целевой функции в методе виртуальных частиц [2] эвристическое управление состояло в выборе базового роя частиц с максимальной оценкой константы Липшица слоя. В рассматриваемой модификации PSO реализовано управление коэффициентами α , β_m , $m=0, 1, 2, 3$ численного алгоритма [2, 3] для каждой частицы-агента, которые определяют интенсивность пяти поисковых составляющих движения частиц: инерционного движения, когнитивной и социальной составляющих движения, движения в направлении взвешенных усредненных координат роя частиц, движения в направлении максимальной изменяемости ЦФ. Для управления коэффициентами вкладов использована технология *нечётких нейронных сетей*. Усиление функции частиц-агентов строится на базе заданных экспертных эвристических правил и последующей подстройки параметров нейронной сети на основе оценок изменяющихся *параметров среды*. К таким параметрам относятся: текущие координаты частиц всех роев и значения ЦФ в них, взвешенные усредненные координаты частиц для каждого из роев и всего ансамбля час-

тиц, оценочные значения локальных констант Липшица для каждой частицы, каждого роя и всего ансамбля частиц.

Эвристические экспертные правила были выбраны следующего вида:

❖ если оценочное значение локальной константы Липшица частицы «не велико», то частица-агент движется преимущественно по инерции и к найденным текущим взвешенным усредненным координатам роя;

❖ если оценочное значение локальной константы Липшица частицы «среднее», то коэффициенты составляющих её дальнейшего движения не изменяются по отношению к прежним значениям на предыдущей итерации;

❖ если оценочное значение локальной константы Липшица частицы «высокое», то увеличивается коэффициент, соответствующий движению этой частицы в направлении максимальной изменяемости ЦФ.

Понятно, что могут быть сформулированы и более детальные экспертные правила *рационального поведения* агентов-частиц. В предложенной реализации метода в качестве ведущего параметра использовано оценочное значение локальной константы Липшица j -ой частицы на k -ой итерации:

$$L^{(j)[k]} = \max_{(i \neq j)(i=1,2,\dots,M^{[k]})} \frac{|f(x^{(i)[k]}) - f(x^{(j)[k]})|}{\|x^{(i)[k]} - x^{(j)[k]}\|}; i = 1, 2, \dots, M^{[k]}. \quad (1)$$

Здесь $x^{(i)[k]}$ – координаты i -й частицы на k -й итерации; $f(x^{(i)[k]})$ – значение ЦФ.

Результаты вычислительных экспериментов

Для наглядного представления работы предлагаемого адаптивного метода роя частиц в графической форме приведены результаты вычислительного процесса поиска глобального минимума для ряда многоэкстремальных тестовых функций.

На рис. 1 показаны результаты процесса минимизации функции двух переменных следующего вида

$$f(x, y) = (x - y)^2 \cdot \cos(x) \cdot \cos\left(\frac{y}{\sqrt{2}}\right) + 2. \quad (2)$$

Стартовые координаты частиц задавались в узлах регулярной сетки 5×5 расчетной области, начальные значения коэффициентов: $\alpha=0$, $\beta_0=0.1$, $\beta_1=0$, $\beta_2=0.2$, $\beta_3=1.2$. Точность (порядка 10^{-2}) по значениям координат лучшей частицы, достигалась за 10-15 итераций, в дальнейшем происхо-

дило последовательное сгущение частиц в окрестности глобального минимума.

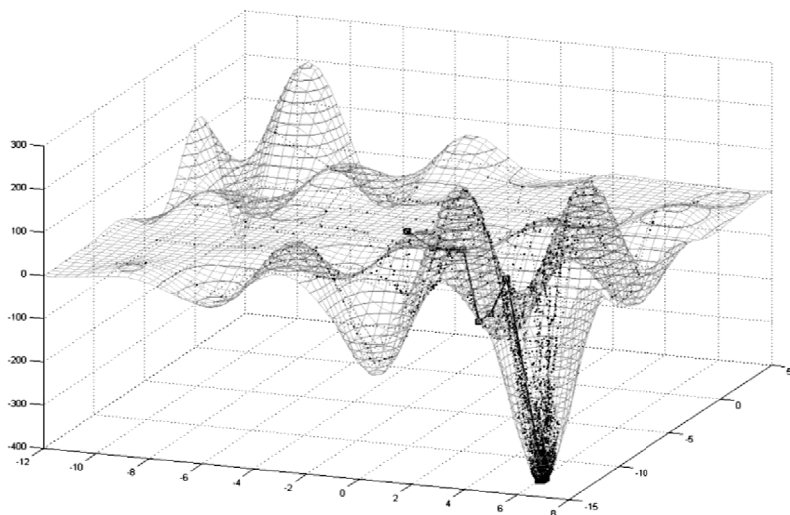


Рис. 1. Процесс поиска глобально минимума для функции (2). Точками и пунктирными линиями показаны промежуточные положения и траектории 25 частиц в рое. Сплошной ломаной линией с маркерами показаны положения точек на поверхности функции для значений усредненных координат $x^{[k]}$ роя частиц

На рис. 2 показаны результаты процесса поиска глобального минимума для негладкой четырех экстремальной функции вида ($n=2$)

$$f(x) = -5 \exp(-3S_1) - 10 \exp(-2S_2) - 7 \exp(-2.5S_3) - 3 \exp(-4S_4), \quad (3)$$

где

$$S_1 = \sum_{i=1}^n |x_i + 1|^{0.6}, \quad S_2 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \\ S_3 = \sum_{i=1}^n |x_i - 1|^{0.8}, \quad S_4 = \sum_{i=1}^n |x_i - 2|^{0.9}.$$

В данном расчете использовано 36 частиц, расположенных при старте в узлах регулярной сетки 6×6 прямоугольной области; усреднение координат проводилось по всем частицам роя; значения координат лучшей частицы (с точностью 10^{-2}) достигали нулевого значения глобального минимума за 8-12 итераций; начальные параметры алгоритма приняты следующими: $\alpha=0$, $\beta_0=0.1$, $\beta_1=0$, $\beta_2=0.2$, $\beta_3=1.2$.

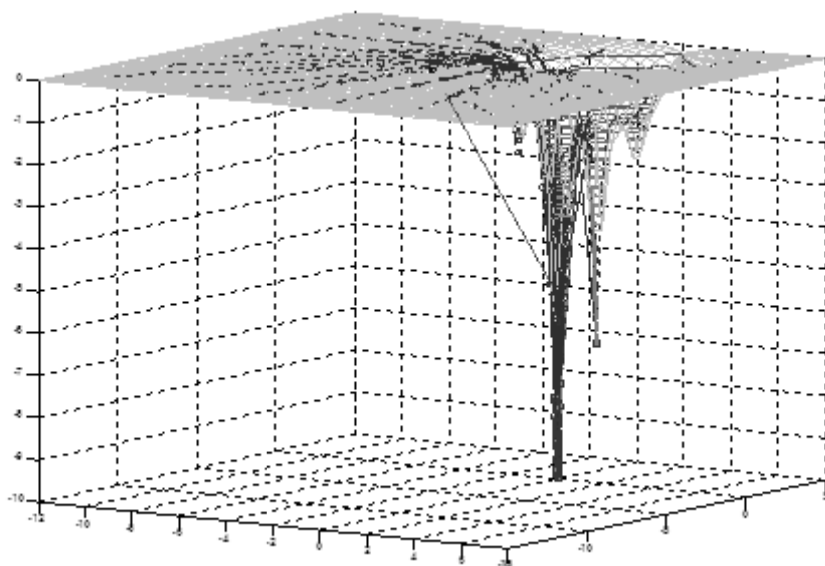


Рис. 2. Процесс поиска глобально минимума негладкой четырёх экстремальной функции (3)

На рис. 3 и 4 представлены результаты расчёты глобального минимума функции (3) для $n=50$. При этом были использованы 50 роев частиц по 100 частиц в каждом рое, усреднение координат проводилось по всем частицам ансамбля, начальные значения параметров алгоритма приняты следующими $\alpha=0.4$, $\beta_0=1.0$, $\beta_1=0$, $\beta_2=1.0$, $\beta_3=2.0$.

На рис. 4 показан процесс минимизации тестовой функции *Растригина* для пятидесяти переменных, в расчёте использовано 10 роев по 100 частиц в каждом рое. Глобальный минимум в данном случае достигнут лучшими частицами за 10 итераций, при заданных 15 итерациях, с точностью 10^{-3} по значению ЦФ. При этом число вычислений ЦФ составило 258603 раза. Результаты расчётов минимизации тестовой функции *Растригина* для 100 переменных представлены на рис. 5 и 6. В расчёте были использованы 10 роев частиц по 100 частиц в каждом рое; усреднение координат проводилось по всем частицам ансамбля. Глобальный минимум достигнут лучшими частицами на 10-ой итерации, при заданных 25 итерациях, с точностью 10^{-4} по значению ЦФ, число вычислений ЦФ составило 799848 раз.

Процесс минимизации тестовой функции Экли для 100 переменных показан на рис. 7. В расчете использовано 10 роев частиц по 100 частиц в каждом рое; усреднение координат проводилось по всем частицам ансамбля. Глобальный минимум достигнут лучшими частицами уже на третьей итерации, при заданных 15 итерациях, с точностью 10^{-4} по значению ЦФ, число вычислений ЦФ составило 452522 раза.

Проведенные вычислительные эксперименты по минимизации функции Растригина и функции Экли при $n=1000$ показали, что если не увеличивать общее количество частиц, то гибридный адаптивный алгоритм приводит к глобальному минимуму за гораздо большее число итераций.

Проведённые вычислительные эксперименты по исследованию работоспособности алгоритма позволяют оценить вклады составляющих движения частиц и проанализировать баланс между «exploration» и «exploitation», т.е. баланс между «исследованием» и «использованием» для данной мультиагентной системы.

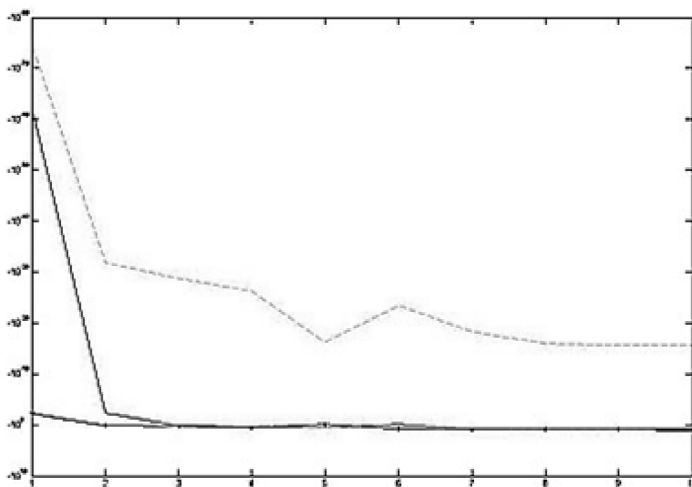


Рис. 3. Минимизация функции (3), $n=50$, горизонтальная ось – число итераций, вертикальная ось – значение ЦФ; верхняя пунктирная линия – изменения максимальных значений ЦФ в списке частиц; сплошная линия – изменение значений ЦФ в усредненных координатах; нижняя сплошная линия с маркерами – изменения минимальных значений ЦФ в списке частиц

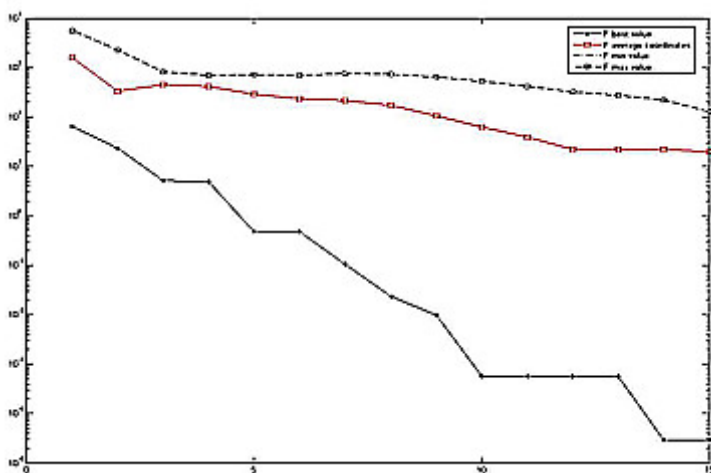


Рис. 4. Минимизация функции Растригина, $n=50$, горизонтальная ось – число итераций, вертикальная ось – значение ЦФ; верхняя пунктирная линия – изменения максимальных значений ЦФ в списке частиц; сплошная линия с прямоугольными маркерами – изменение значений ЦФ в усредненных координатах; нижняя сплошная линия с маркерами – изменения минимальных значений ЦФ в списке частиц

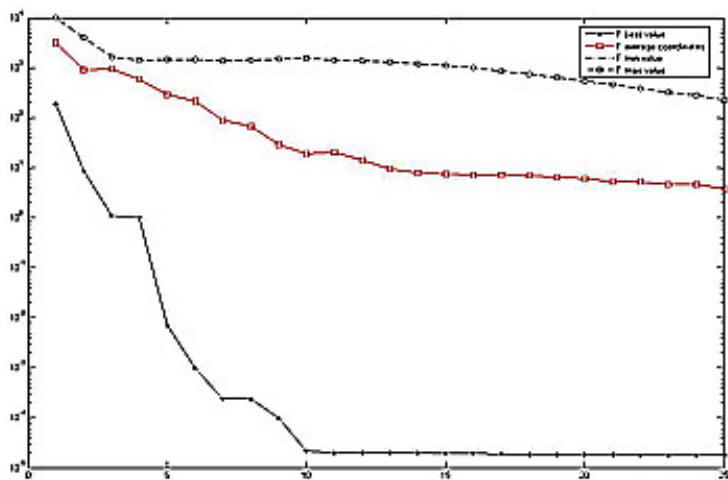


Рис. 5. Минимизация функции Растригина для 100 переменных

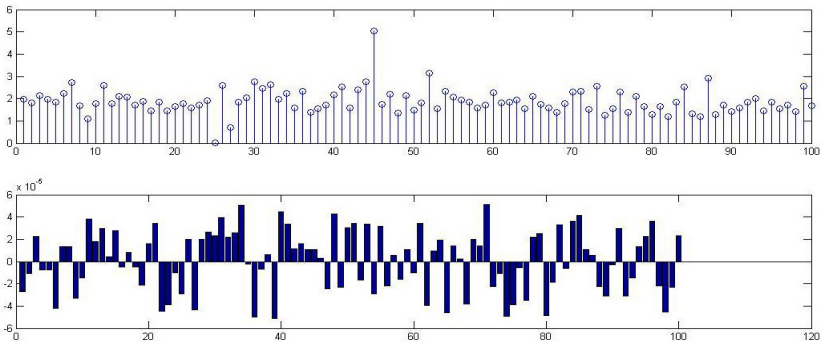


Рис. 6. На верхнем рисунке показано распределение значений функции Растригина по частицам одного роя, нижний рисунок – значения 100 координат лучшей частицы, которая достигла глобального минимума – ноль по всем координатам с точностью 10^{-5}

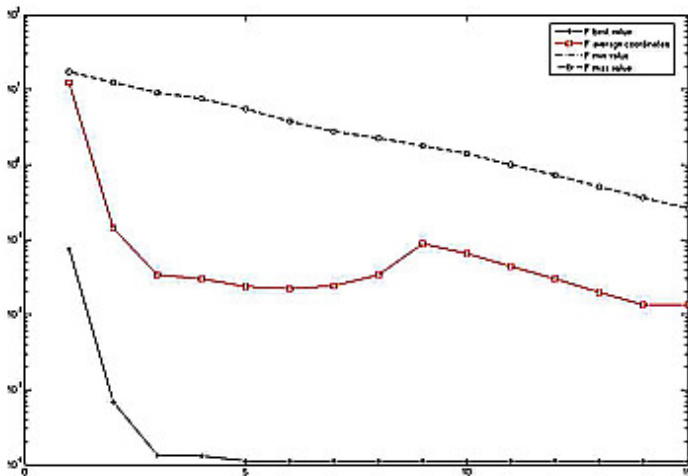


Рис.7. Минимизация функции Экли для 100 переменных

Заключение

Повышение адаптивных свойств вычислительных алгоритмов и усиление роевого интеллекта в мультиагентных системах, предназначенных для решения задач ГО, главным образом связано с необходимостью эф-

фективного моделирования рационального поведения частиц-агентов и информационно ёмкого описания параметров среды, что может быть реализовано как нейро-нечёткое управление адаптивным изменением параметров вычислительного алгоритма.

Список литературы

1. Карпенко А.П., Селивестров Е.Ю. Обзор методов роя частиц (Particle Swarm Optimization). // Электронное научно-техническое издание «Наука и образование», 2009. № 3. <http://technomag.edu.ru/doc/116072.html>
2. Кошур В.Д., Рыжикова Е.О. Роевой интеллект, нечеткий логический вывод и мультиагентные технологии в методе глобальной оптимизации. // XV Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2013»: Сборник научных трудов. Ч. 2. М.: НИЯУ МИФИ. 2013. С. 12-21.
3. Кошур В.Д. Глобальная оптимизация на основе гибридного метода усреднения координат и метода роя частиц. // Вычислительные технологии, 2013. Т. 18. № 4. С. 36-47.
4. Кошур В.Д., Рыжикова Е.О. Усиление роевого интеллекта в методе глобальной оптимизации на основе виртуальных частиц. // Интеллект и наука: труды XIII Международной молодежной научной конференции. Железногорск, 2013. С. 89-90.
5. Кошур В.Д. Методы глобальной оптимизации и повышение адаптивных свойств вычислительных алгоритмов. Интеллектуализация поиска экстремумов // XVI Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием «Нейроинформатика-2014»: Лекции по нейроинформатике. М.: НИЯУ МИФИ, 2014. С. 46-61.
6. Рутковская Д., Пилинский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. // М.: Горячая линия – Телеком, 2004.
7. Курейчик В.М., Лебедев Б.К., Лебедев О.Б. Поисковая адаптация: теория и практика. М.: Физматлит, 2006.
8. Shoham Y., Leyton-Brown K. Multiagent Systems. Algorithm, Game-Theoretic, and Logical Foundations. // Cambridge University Press., 2009.
9. Кошур В.Д. Компьютерные технологии мультиагентных систем и глобальная оптимизация. // Сборник научных трудов по материалам Международной заочной научно-практической конференции «Теоретические и прикладные проблемы науки и образования в 21 веке», 31 января 2012 г., в 10 частях. Ч. 9; Министерство образования и науки Российской Федерации. Тамбов: ТРОО «Бизнес-Наука-Общество», 2012. С. 63-65.
10. Кошур В.Д. Мультиагентные системы и поиск глобального минимума негладких потенциальных функций. // Материалы III Международной научно-практической конференции «Системный анализ. Информатика. Управление», САИУ-2012, Украина, Запорожье, 14-16 марта 2012г. / Министерство образования и науки Украины, Академия наук высшей школы Украины, Классический приватный университет. Запорожье: КПУ. 2012. С. 157-159.

О.А. МИШУЛИНА, И.Н. СУКОНКИН

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
mishulina@gmail.com, chaosstruct@gmail.com

ЭВОЛЮЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОГО КРИТЕРИЯ СТАНДАРТНЫХ ОБЪЕМОВ КЛАСТЕРОВ

Предложен критерий кластеризации данных в условиях разных геометрических размеров кластеров, относительных чисел содержащихся в них выборочных точек и возможной неполноты признаков для их однозначного разграничения. Критерий, названный *SV*-критерием, позволяет при априорно неизвестном числе кластеров в выборке данных получить устойчивую оценку их реального числа в располагаемых данных. Разработан генетический алгоритм, использующий предложенный критерий. На модельных примерах показаны практические возможности алгоритма.

Ключевые слова: *кластеризация, SV-критерий, индексы валидности кластеризации, расстояние Махаланобиса, генетический алгоритм.*

O.A. MISHULINA, I.N. SUKONKIN

National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow

EVOLUTIONARY ALGORITHM FOR DATA CLUSTERING BASED ON STATISTICAL CRITERION OF CLUSTERS STANDARD VOLUME

A new statistical criterion for data clustering is proposed. It can be used for data samples with special properties: different geometrical dimensions of the clusters in the feature space; significant difference between the numbers of sample points contained in the clusters; possible incompleteness of the features. Criterion, called *SV*-criterion allows for a priori unknown number of clusters in the sample data to obtain a stable estimate of their actual number. A genetic algorithm using the proposed criterion is developed. Model examples illustrate practical possibilities of the algorithm.

Keywords: *clustering, SV-criterion, validity indices for clustering, Mahalanobis distance, genetic algorithm.*

Введение

Разнообразие прикладных задач кластеризации данных, необходимость анализа внутренней структуры больших объемов экспериментальных данных стимулируют исследователей к разработке алгоритмов кластеризации, обладающих повышенной точностью и достоверностью принимаемых решений. Основы теории кластеризации данных и современное состояние исследований в этой области полно представлены в монографиях [1, 2].

Постановка задачи кластеризации предполагает, что известна выборка данных $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_P\}$, где $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iN})$, $i = 1, 2, \dots, P$ – вектор признаков объектов, подлежащих кластеризации. Требуется разбить множество векторов X на непересекающиеся подмножества $C^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, K$, называемые кластерами, таким образом, чтобы вектора внутри кластеров обладали максимальным подобием.

Пусть $\mathbf{m}_k$, $k = 1, 2, \dots, K$ – центры кластеров, определяемые как средние значения векторов, принадлежащих подмножествам $C^{(k)}$:

$$\mathbf{m}^{(k)} = \frac{1}{P_k} \sum_{\mathbf{x}_i \in C^{(k)}} \mathbf{x}_i, \quad \mathbf{m}^{(k)} = (m_1^{(k)}, m_2^{(k)}, \dots, m_N^{(k)}), \quad (1)$$

где P_k – число точек в кластере k , $\sum_{k=1}^K P_k = P$. Каждый кластер характеризуется показателями сгруппированности принадлежащих ему векторов около своего центра по всем координатам. В качестве таких показателей используются среднеквадратичные отклонения от центров кластеров:

$$d_j^{(k)} = \frac{1}{P_k} \sum_{\mathbf{x}_i \in C^{(k)}} (x_{ij} - m_j^{(k)})^2, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

Критерием качества кластеризации традиционно принимается суммарный средний квадрат отклонений по всем координатам и кластерам:

$$\tilde{J}(C^{(1)}, C^{(2)}, \dots, C^{(K)}) = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^N d_j^{(k)}. \quad (3)$$

Рассмотренная задача относится к классу NP -сложных [2] и может быть решена лишь приближенно с помощью различных подходов, среди которых наиболее распространенным является метод K -means [3] и его многочисленные модификации.

Приведенная постановка задачи (1) – (3) ориентирована на простейшие структуры сферических кластеров, в частности, на кластеры с гауссовым

распределением признаков. Примеры подобных кластеров приведены на рис. 1.

Несмотря на усилия многих исследователей на протяжении нескольких десятилетий, до сих пор остаются актуальными вопросы, сформулированные в 1988 году в монографии Jain, Anil K., Dubes, Richard C. *Algorithms for Clustering Data* [1]. Выделим вопросы, которым уделяется особое внимание в предлагаемой работе.

1. Что такое кластер? Какова его математическая модель и характеристики?
2. Как установить реальное число кластеров, содержащихся в выборке данных?
3. Как определить расстояние от произвольной точки до центра кластера?
4. Как оценить значимость (валидность) выявленных кластеров данных?
5. Какой метод использовать для решения задачи кластеризации?

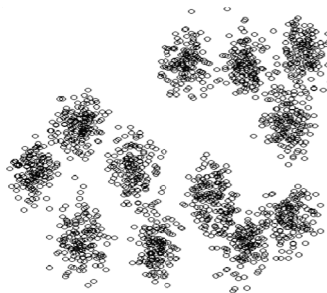


Рис.1. Пример сферических кластеров

Обсуждение особенностей кластеров данных

Данные, которые необходимо сгруппировать, могут быть неполными. Некоторые признаки объектов могут отсутствовать по тем или иным причинам (невозможность измерения, незнание природы изучаемого явления и пр.). В частности, это могут быть признаки, отсутствие которых приводит к частичному наложению кластеров в пространстве признаков. На рис. 2 показаны два примера подобных ситуаций. При наличии дополнительных признаков наложения кластеров можно было бы избежать. Существование областей в пространстве признаков, принадлежащих одновременно двум кластерам, не приводит в рассмотренных примерах к нарушению геометрической структуры данных и оставляет шанс на их верную кластеризацию.

Другая особенность данных состоит в том, что числа точек P_k в разных кластерах $k = 1, 2, \dots, K$ могут значительно различаться. Практика показывает, что малый по геометрическому объему в пространстве признаков, но плотный по числу точек кластер может в результате выполнения процедуры кластеризации слиться с большим кластером, представленным в выборке относительно малым числом точек.

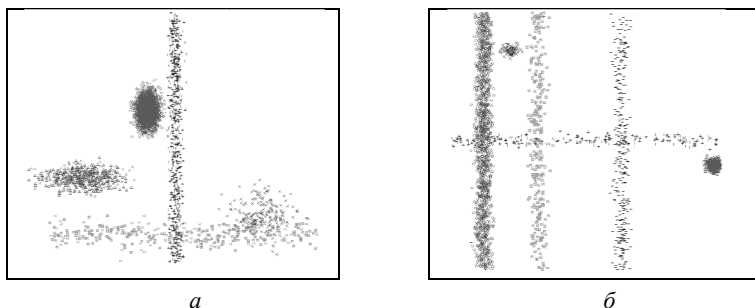


Рис. 2. Примеры расположения кластеров с двумерными векторами признаков объектов

Будем рассматривать кластеры, которые представляются в пространстве признаков выпуклой областью. На рис. 2 такими областями являются эллипсы и прямоугольники в плоскости.

В этой работе рассматривается частный случай, когда признаки объектов (при условии их принадлежности любому выбранному кластеру) являются независимыми.

Попытка применения метода K -means к данным, представленным на рис. 2, б, привела к результатам, показанным на рис. 3. В выборке данных кластерам соответствовали следующие относительные числа $p_k = P_k / P$, $k = \overline{1, 6}$, принадлежащих им выборочных точек:

$$p_1 = 0.57, p_2 = 0.07, p_3 = 0.12, p_4 = 0.07, p_5 = 0.06, p_6 = 0.11.$$

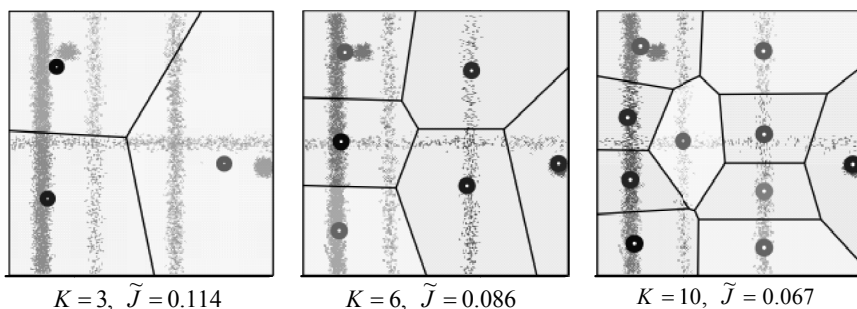


Рис. 3. Результаты кластеризации данных примера рис. 2б методом K -means для разных заданных чисел классов ($K = 3, 6, 10$). Кружками показаны центры найденных кластеров. Для каждого случая указано достигнутое значение критерия $\tilde{J}$

Как следует из полученных результатов, кластеризация методом *K-means* не позволила выявить подлинную структуру данных: некоторые геометрические объекты, представленные достаточным числом выборочных точек, оказались раздробленными на фрагменты, а выявленные кластеры содержат фрагменты разных геометрических объектов.

В работе ставится цель такой формулировки задачи кластеризации данных и построения такого алгоритма кластеризации, которые позволили бы не искажать структуру данных в пространстве признаков при условии, что кластеры обладают описанными выше свойствами.

Выбор критерия при поиске решения задачи кластеризации

При решении задачи кластеризации данных необходимо, чтобы алгоритм противодействовал как слиянию кластеров, близко расположенных в пространстве признаков, так и дроблению кластеров, когда установлено число кластеров, превышающее их реальное количество в выборке данных. Это требование не может быть обеспечено алгоритмами кластеризации, использующими для оценки качества кластеризации квадратичный показатель (внутрикластерную дисперсию):

$$\tilde{J}_k = \sum_{j=1}^N d_j^{(k)}. \quad (4)$$

Мы предлагаем использовать показатель R_k вариабельности кластера, названный нами «стандартным размером кластера». Показатель R_k определен через «стандартный объем кластера» V_k следующим выражением:

$$R_k = \sqrt[N]{V_k}, \quad (5)$$

где $V_k = \prod_{j=1}^N s_j^{(k)}$; $s_j^{(k)} = \sqrt{d_j^{(k)}}$ – стандартное отклонение по координате j вектора признаков в кластере k . Далее будем иллюстрировать стандартный объем V_k кластера прямоугольным параллелепипедом со сторонами длины $s_j^{(k)}$, $j = 1, 2, \dots, N$, расположенными симметрично относительно центра кластера (рис. 4).

Введенный статистический показатель стандартного размера кластера R_k предлагается использовать для построения целевой функции J при поиске оптимального решения задачи кластеризации:

$$J(C^{(1)}, C^{(2)}, \dots, C^{(K)}) = \sum_{k=1}^K \varphi(R_k), \quad (6)$$

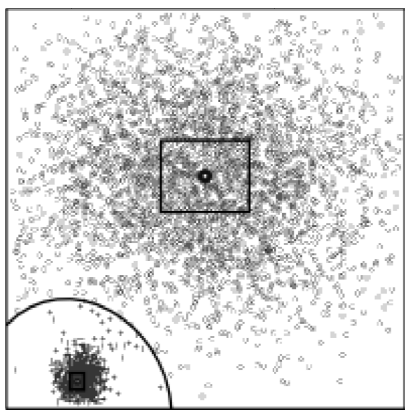


Рис. 4. Два кластера с двумя независимыми признаками объектов и схема расположения их стандартных объемов. Показана граница между кластерами

где $\varphi(R_k) = J_k$ – положительная неубывающая функция, выбор которой может варьироваться в разных прикладных задачах.

Будем называть предложенный критерий, основанный на понятии стандартного объема кластера, SV -критерием. В отличие от критерия (3), SV -критерий позволяет не дробить кластеры, имеющие по некоторым направлениям дисперсию, существенно превышающую ее среднее значение по всем направлениям. В приведенных далее модельных примерах была применена функция $J_k = \varphi(R_k) = (R_k)^2$.

Индексы валидности кластеров для анализа результата кластеризации

Известны индексы валидности кластеризации, предназначенные для разных типов данных и методов кластеризации [2, 4, 5]. В этой работе предлагаются два индекса λ_V и λ_P , которые характеризуют рассеяние кластеров в пространстве признаков (λ_V) и концентрацию в них выборочных точек (λ_P). Для построения индексов используется понятие стандартного объема кластеров V_k , $k = 1, 2, \dots, K$.

Рассмотрим полную выборку данных как объединенный кластер C_0 и рассчитаем его центр и объем V_0 по изложенной выше схеме. Рассчитаем также для каждого кластера $k = 0, 1, \dots, K$ число точек Q_k и среднюю плотность точек $q_k = Q_k / V_k$, попавших в стандартный объем. Индексы валидности кластеризации λ_V и λ_P определим выражениями:

$$\lambda_V = \sum_{k=1}^K V_k / V_0 ; \quad \lambda_P = q_0 / \sum_{k=1}^K (p_k q_k) . \quad (7)$$

Чем меньше значения индексов, тем более достоверной является кластеризация. Индекс λ_P имеет простую интерпретацию и рекомендуется применять для контроля объединения или раздела пар кластеров.

Мера расстояния от точки до центра кластера

При построении процедуры кластеризации, ориентированной на разграничение групп данных в соответствии с их геометрическими или статистическими свойствами (partitional methods, в отличие от иерархических процедур – hierarchical methods), важно выбрать меру расстояния от произвольной точки до центра кластера. Расстояние Махаланобиса отражает степень соответствия координат точки распределению выборочных примеров в кластере, что согласуется с поставленной целью. Расстояние Махаланобиса использовалось при решении задач кластеризации многими исследователями [6, 7].

Поскольку признаки в кластерах предполагаются независимыми, расстояние Махаланобиса от произвольной точки $\mathbf{x}$ до центра $\mathbf{m}^{(k)} = (m_1^{(k)}, m_2^{(k)}, \dots, m_N^{(k)})$ k -го кластера с дисперсиями $d_j^{(k)}$, $j = 1, 2, \dots, N$, по координатным направлениям определяется выражением:

$$(\rho_{\mathbf{x}}^{(k)})^2 = \sum_{j=1}^N \frac{(x_j - m_j^{(k)})^2}{d_j^{(k)}}. \quad (8)$$

При известных центрах кластеров и дисперсиях по координатным направлениям произвольная выборочная точка $\mathbf{x}$ относится к кластеру k^* согласно следующему правилу:

$$k^* = \arg \min_k (\rho_{\mathbf{x}}^{(k)}, k = 1, 2, \dots, N). \quad (9)$$

Эволюционный алгоритм кластеризации

Эволюционные алгоритмы неоднократно применялись для решения задач кластеризации данных [8, 9], так как в отличие от обычно используемых в практике итерационных процедур позволяют найти устойчивое решение, близкое к оптимальному. Каждый из алгоритмов использует специфику решаемой задачи и избранный автором теоретический подход к ее решению.

Правило (9) распределения выборочных точек по кластерам и критерий (6) оценки качества кластеризации положены в основу разработанного генетического алгоритма (ГА). Признаки x_i , $i = 1, 2, \dots, N$, отмасштаби-

рованы таким образом, что для всех выборочных точек они принадлежат интервалу $[0; 1]$.

Хромосома содержит $2KN$ генов, представленных действительными числами в интервале $[0; 1]$. Каждому кластеру k в хромосоме сопоставлены гены $\mu_1^{(k)}, \mu_2^{(k)}, \dots, \mu_N^{(k)}, \theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)}, \dots, \theta_N^{(k)}$. Гены $\mu_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \dots, N$, являются приближением к координатам центра $m_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \dots, N$, k -го кластера, а гены $\theta_i^{(k)}$ — к $d_i^{(k)}$. Для того чтобы в эволюционном процессе осуществлялось указанное приближение, критерий качества кластеризации (6) модифицируется:

$$J(C^{(1)}, C^{(2)}, \dots, C^{(K)}) = \sum_{k=1}^K \varphi(R_k) + \alpha \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N (m_i^{(k)} - \mu_i^{(k)})^2 + \beta \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N (d_i^{(k)} - \theta_i^{(k)})^2, \quad (10)$$

где α и β — положительные параметры критерия.

Обработка каждой хромосомы поколения выполняется в следующем порядке:

- осуществляется распределение всех выборочных точек по кластерам с использованием выражений (8) и (9), в которых координаты центров кластеров и дисперсий заменяются на их приближения, записанные в генах хромосомы;
- для каждого кластера по формулам (1) и (2) рассчитываются реальные координаты центра и значения дисперсий;
- с использованием формул (5), (10) оценивается показатель J качества кластеризации — значение фитнес-функции соответствующей хромосомы.

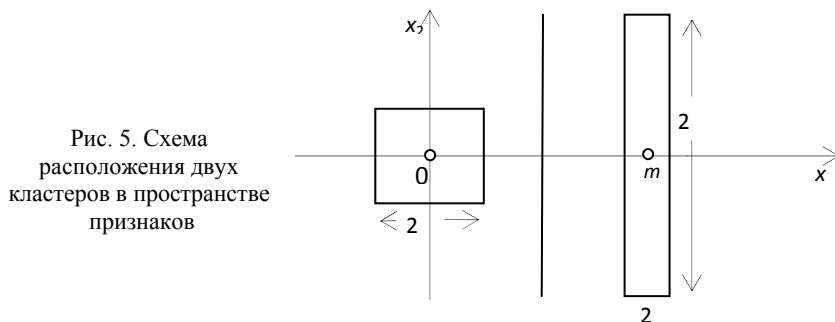
После обработки всех хромосом выполняются типовые генетические операции, которые формируют следующее поколение хромосом.

После завершения эволюционного процесса для выявленных кластеров, рассчитанных для лучшей хромосомы, оцениваются индексы валидности кластеризации.

Расчетный пример

Рассмотрим задачу кластеризации, в которой вектор признаков объектов имеет размерность $N=2$, а в выборке данных содержатся два кластера, схема расположения которых в пространстве признаков представлена на рис. 5. Предполагается, что выборочные точки равномерно распределены в каждом кластере, а априорные вероятности принадлежности точки каждому из кластеров равны соответственно p_1 и p_2 ($p_1 + p_2 = 1$).

Простота структуры данных позволяет получить расчетные формулы для объемов кластеров V_0, V_1, V_2 , если граница между кластерами представляет собой вертикальную прямую, проведенную в разделяющем их интервале (рис. 5) ($m \geq a + b$).



На рис. 6, а приведены графики зависимости индексов валидности λ_V и λ_P от расстояния между центрами кластеров m в предположении $p_1 = p_2 = 0.5$, $a = 0.1$, $b = 0.05$, $c = 0.5$. На рис. 6, б показана зависимость индексов валидности λ_V и λ_P от m при тех же условиях кластеризации.

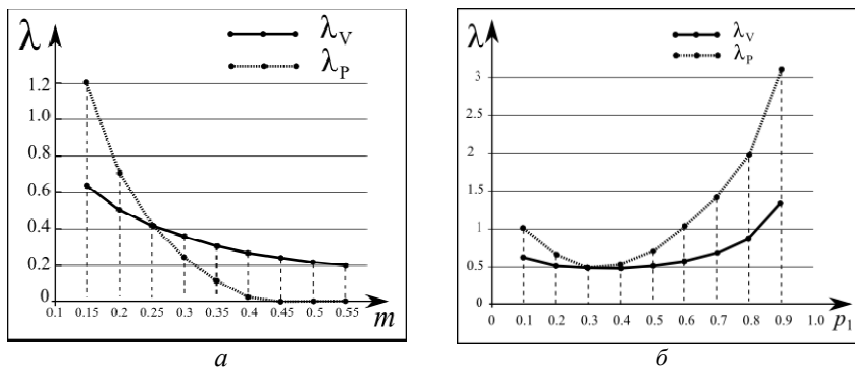


Рис. 6. Графики зависимости индексов валидности λ_V и λ_P :

а – от расстояния между центрами кластеров m при $p_1 = p_2 = 0.5$;

б – от вероятности p_1 принадлежности точки первому кластеру при постоянном значении $m = 0,2$

Выполнение неравенства $J < J_0$ означает целесообразность дробления данных на кластеры. В примере это соответствует условию $\lambda_V < 1$. При

значении $\lambda_p \geq 1$ один из кластеров принимается несущественным в связи с малым числом входящих в него точек.

Результаты моделирования

Для демонстрации особенностей работы эволюционного алгоритма кластеризации с предложенным SV -критерием рассмотрены три набора двумерных данных (рис. 7 – 9).

Первый набор данных содержит 5 двумерных кластеров. Число P_k , $k = 1, 5$, примеров в разных кластерах находится в пределах от 500 до 6000, распределение признаков в кластерах близко к гауссову, форма кластеров эллиптическая.

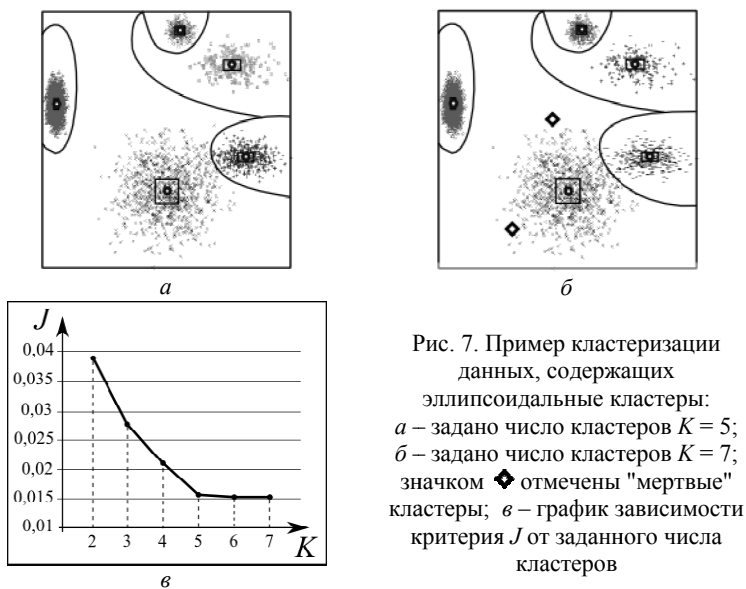


Рис. 7. Пример кластеризации данных, содержащих эллипсоидальные кластеры:
 a – задано число кластеров $K = 5$;
 b – задано число кластеров $K = 7$;
 значком $\blacklozenge$ отмечены "мертвые" кластеры; v – график зависимости критерия J от заданного числа кластеров

На рис. 7 приведены результаты кластеризации при установке значений параметра K алгоритма, равных 5 (истинное число кластеров) и 7 соответственно. Предложенный SV -критерий препятствует ложному дроблению кластеров. Лишние искомые кластеры становятся пустыми или содержат минимальное число примеров. На графике рис. 9в показано, что при увеличении заданного числа кластеров вплоть до истинного значения

$K = 5$, значение критерия J заметно уменьшается. Дальнейшее увеличение параметра K практически не изменяет значение критерия.

Второй пример (рис. 8, *а*) содержит как эллиптические кластеры, так и «полосовые», для которых вариация по одному из признаков на порядок меньше, чем по другому. Число кластеров $K = 6$. Плотность точек в разных кластерах существенно различается.

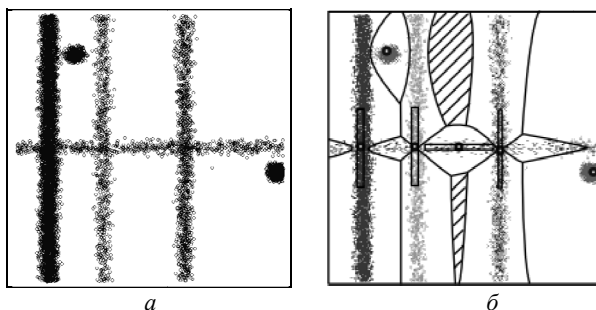
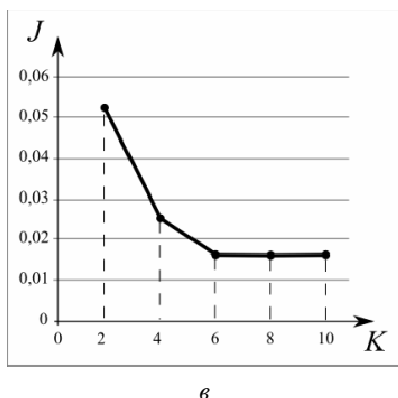


Рис. 8. Пример кластеризации данных, содержащих «полосовые» кластеры



На рис. 8, *б* показаны границы между кластерами, которые соответствуют результату кластеризации с помощью ГА. Штриховкой отмечены области пространства признаков, которые не могут быть достоверно отнесены ни к одному из кластеров. Алгоритм выделил все 6 кластеров. Горизонтальный «полосовой» кластер в силу его пересечения с вертикальными «полосовыми» кластерами оказался объединенным из нескольких несвязных фрагментов. Таким образом, алгоритм правильно распознал структуру данных при наличии пересечений кластеров (недостаточности призна-

ков для их разделения). График, представленный на рис. 8, *в*, показывает сходное с предыдущим примером поведение критерия J .

Результат обработки данных второго примера с помощью алгоритма K -means показан на рис. 3. Видно качественное различие выделенных кластеров алгоритмом K -means и предложенным ГА при разных значениях параметра K .

В заключительном примере набор двумерных данных обработан с помощью трех методов: разработанным ГА на основе SV -критерия (рис. 9, *а*), алгоритмом K -means (рис. 9, *б*) и методом агломеративной кластеризации по правилу ближайшего соседа (рис. 9, *в*).

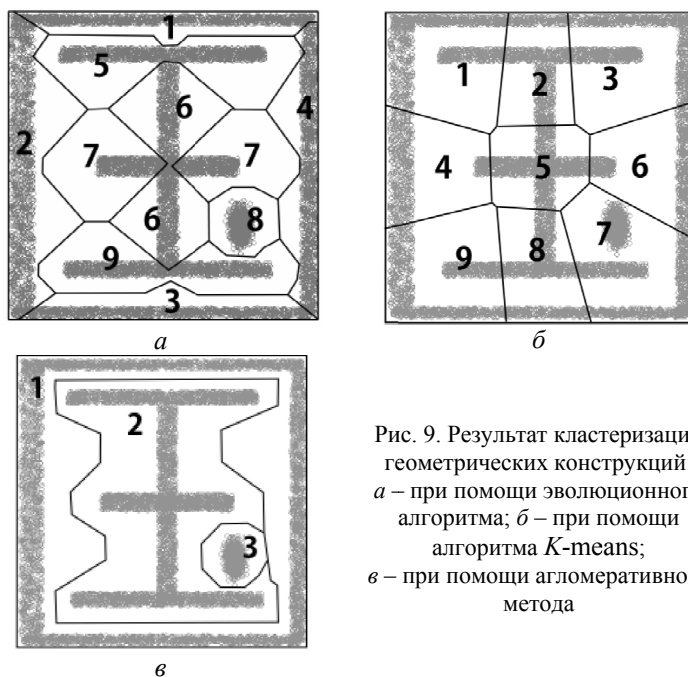


Рис. 9. Результат кластеризации геометрических конструкций:
а – при помощи эволюционного алгоритма; *б* – при помощи алгоритма K -means;
в – при помощи агломеративного метода

Данные содержат эллипсоидальный и «полосовые» кластеры с равномерным распределением точек. Для всех алгоритмов искомое число кластеров K было задано равным 9. Предложенный алгоритм сформировал 9 кластеров, соответствующих геометрическим примитивам, в то время как алгоритм K -means определил неинтерпретируемые кластеры, а агломеративный метод определил только 3 кластера, соответствующие связным

областям (остальные 6 кластеров оказались одноточечными и содержали случайные выбросные значения).

Выводы

Предложен SV -критерий качества кластеризации, основанный на понятии «стандартного объема кластера». Разработан генетический алгоритм кластеризации данных, в котором использован SV -критерий в совокупности с оценкой расстояния по метрике Махаланобиса.

Предложенные модельные эксперименты показали, что с помощью предложенного алгоритма могут быть достигнуты важные для практических приложений результаты кластеризации: простая интерпретируемость кластеров; возможность определения априорно неизвестного числа кластеров; стабильность кластеров при задании их числа, превышающего реальное число кластеров в данных; допустимость пересечения кластеров, не нарушающего существенно структуру данных.

Изложенная в работе методика, продемонстрированная на примерах с независимыми признаками объектов, может быть обобщена на случай коррелированных признаков.

Список литературы

1. Jain, Anil K., Dubes, R.C. Algorithms for Clustering Data. //Prentice Hall. 1988.
2. Gan G., Ma C., Wu J. Data Clustering: Theory, Algorithms, and Applications. ASA-SIAM series on statistics and applied probability. //SIAM, Philadelphia, ASA, Alexandria, 2007. VA.
3. Jain, Anil K. Data Clustering: 50 years beyond K-means. //Pattern Recognition Letters, 2010. V. 31.
4. Halkidi M., Batistakis Y., Vazirgiannis M. On Clustering Validation Techniques. //Journal of Intelligent Information Systems, 2001. V. 17, 2/3.
5. Davies, David L., Bouldin, Donald W. A Cluster Separation Measure. //IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. V. PAMI-1, issue 2. 1979.
6. Mao, J., Jain, A.K. A Self-Organizing Network for Hyper-Ellipsoidal Clustering (HEC). //IEEE Trans. Neural Networks 7 (January). 1996.
7. Xiang S., Nie F., Zhang C. Learning a Mahalanobis Distance Metric for Data Clustering and Classification. // Pattern Recognition, 2008. 41 (12).
8. Liu Y., Wu X., Shen Y. Automatic Clustering Using Genetic Algorithms. //Applied Mathematics and Computation, 2011. V. 218.
9. Liu Yo., Mao Ye, Jun Peng and Hong Wu. Finding the Optimal Number of Clusters Using Genetic Algorithms. //IEEE Conference on Cybernetics and Intelligent Systems (CIS) - Chengdu, China, 2008.

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ

- А –
Аникин В. И. 118
Кошур В. Д. 189
Крыжановский Б. В. 81
Кузин М. В. 108
- Б –
Бекирев А. С. 108
Бондарев В. Н. 100, 169
Буриков С. А. 31, 41
Лавренков Ю. Н. 158
Литинский Л. Б. 81
- В –
Вульфин А. М. 92
Мишулина О. А. 199
Мягкова И. Н. 128
- Г –
Гущин К. А. 41
Павловский В. Е. 177
Персианцев И. Г. 61, 128
Петряйкин А. В. 71
Протасова М. А. 138
- Д –
Доленко С. А. 128
Доленко Т. А. 31, 41
Потасова М. А. 138
- Е –
Егорчев М. В. 20
Ефиторов А. О. 31
Савицкий А. В. 177
Светлов В. А. 61
Сенюкова О. В. 71
Суконкин И. Н. 199
- З –
Зобнин Д. С. 71
Тюменцев Ю. В. 10
- И –
Иванов Н. А. 92
Шацик В. Н. 148
Широкий В. Р. 51
Шугай Ю. С. 61
- К –
Карманова А. А. 118
Климов В. В. 108
Козлов Д. С. 10
Комарцова Л. Г. 158
Щукин Б. А. 108
- М –
– П –
– С –
– Т –
– Ш –
– Щ –