

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И
ИНФОРМАТИКИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

**АНАЛИЗ ВЕСОВ НЕЙРОННОЙ СЕТИ
ПРИ ОБРАБОТКЕ ДАННЫХ В ФИЗИКЕ**

Выполнила студентка
435 группы
Витюгова Юлия Михайловна

Научный руководитель:
Зав.лаб., к.ф.-м.н. Доленко С. А.

Допущена к защите
Зав. кафедрой математического моделирования и информатики
д.ф.-м.н., проф. А.И. Чуличков

Москва
2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. ЦЕЛЬ РАБОТЫ.....	5
2. ПОСТАНОВКА ФИЗИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ	6
2.1. ЭКСПЕРИМЕНТ	6
2.2. ДАННЫЕ	9
3. ОБЗОР ИСПОЛЬЗУЕМЫХ МЕТОДОВ.....	11
3.1. Искусственные нейронные сети	11
3.1.1. Топология нейронных сетей и процесс обучения.....	11
3.1.2. Проблемы построения нейросетевой модели.....	15
3.2. Понятие размерности данных и их понижение	16
3.3. Методы понижения размерности данных.....	17
3.4. Понятие существенности входных признаков	18
3.4.1. Алгоритмы оценки существенности входных признаков.....	18
3.4.1.1. Метод перемешивания значений входных признаков	19
3.4.1.2. Метод фиксации значений входных признаков	20
3.4.1.3. Метод анализа весов нейронной сети.....	20
3.4.1.4. Метод глубокого разложения Тейлора.....	21
3.4.2. Алгоритмы отбора входных признаков	26
3.4.2.1. Алгоритм отсечения по порогу	26
3.4.2.2. Алгоритм использования случайно сгенерированных признаков....	27
3.4.2.3. Алгоритм множественных запусков.....	27
3.4.2.4. Алгоритм заданного числа наилучших признаков	27
3.4.3. Сравнение методов анализа существенности входных признаков.....	28
4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ	29
4.1. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПРОГНОЗОВ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ	29
4.2. ПАРАМЕТРЫ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ	29
4.3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА СУЩЕСТВЕННОСТИ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ.	30
5. РЕЗУЛЬТАТЫ.....	31
ВЫВОДЫ.....	35
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	35
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	36

ВВЕДЕНИЕ

В современном мире нас окружает множество интеллектуальных систем наблюдения, которые используются для мониторинга и анализа процессов, сигналов. Различные сферы автоматизации заинтересованы в сборе данных из интеллектуальных систем и сенсорного наблюдения. Растущий интерес промышленной отрасли связан не только с автоматизацией и контролем качества производств, но и с определением дефектов, предотвращением отказов оборудования, приводящих как к потерям производства, так и представляющих серьезную опасность для здоровья и жизни работников, а также приводящих к негативным экологическим последствиям.

С экспоненциальным увеличением способности собирать данные, анализировать их с высокой скоростью и точностью, сенсорные технологии эволюционировали, что является существенным прогрессом для автоматизации. Однако, необходимо учитывать потенциальные недостатки происходящих процессов, а именно: появление огромных объемов сенсорных данных и высокую стоимость потребляемых ресурсов. Вследствие перечисленного, оптимизация сбора, хранения и анализа сенсорных данных является немаловажным направлением деятельности в современном мире [1].

Учитывая повсеместное проникновение цифровых технологий, развитие микроэлектроники и коммуникационных технологий, можно утверждать, что ручной анализ и простые механические инструменты обработки данных стали неэффективными и непригодными. Автоматизированные методы анализа данных, которые опираются на алгоритмы машинного обучения, представляют собой мощный инструментарий для решения этой проблемы.

Следует отметить способность современных методов машинного обучения классифицировать, идентифицировать или интерпретировать объёмные наборы данных, характеризуемых слабой моделируемостью, высоким уровнем шума, которые невозможно анализировать с использованием моделей физических процессов и традиционных алгоритмов математической статистики. Методы машинного обучения обладают высокой степенью результативности их применения с целью предоставления физикам инструментов для анализа и обработки экспериментальных наборов данных [2].

Объектом исследования в настоящей работе были данные, полученные с полупроводниковых сенсоров. Сенсоры приставляют собой устройства, позволяющие обнаружить изменения в окружающей среде и генерирующие соответствующий отклик. Сенсорные данные представимы в виде временных рядов, анализ которых позволяет контролировать изменение состояния объекта мониторинга во времени, изучать закономерности поведения, выявлять тенденции, удаленно диагностировать неисправности, принимать

обоснованные решения по управлению объектом. Применение газовых сенсоров для мониторинга атмосферного воздуха очень перспективно с точки зрения ряда практических задач [3]. Разработка роботизированных инструментов [4] прямого мониторинга целостности трубопроводной системы во время эксплуатации может быть одним из возможных обоснований для постановки и решения задачи идентификации паров летучих компонентов. Проверка трубопровода основана на различных оценках: с помощью численных моделей, на основе параметров работы трубопровода, обнаружения акустической эмиссии и т.д. [5]. Сенсоры рассматриваемого типа изменяют свои электрические свойства (сопротивление) при контакте с различными газами, что позволяет определять состав газовых смесей и обнаруживать утечки.

Данная задача имеет ряд особенностей. Одна из главных – отсутствие аналитического решения, которое позволило бы точно определить состав газовых смесей, поэтому для решения этой проблемы в данной работе использовался один из методов машинного обучения – *искусственные нейронные сети* (ИНС), позволяющие построить аппроксимационную модель исследуемого объекта. Нейронная сеть (НС) в данном вычислительном эксперименте определяла тип и значение концентрации одного из газов: пропана или водорода.

Поскольку данные газовых сенсоров имеют высокую размерность, возникает необходимость в использовании подходов для ее снижения. Исследованию эффективности таких подходов, а именно различным алгоритмам анализа существенности для отбора входных признаков на реальных данных посвящена настоящая работа.

Рассмотрены основные концепции и 4 метода анализа существенности входных признаков (АСВП): *метод анализа весов нейронной сети* (МАВНС), *метод перемешивания значений входных признаков* (МПЗВП), *метод фиксации значений входных признаков* (МФЗВП), *метод глубокого разложения Тейлора* (МГРТ), позволяющие понизить сложность обработки и анализа больших объемов сенсорных данных высокой размерности. Кроме того, АСВП помогает в расшифровке "черного ящика" нейросетевых алгоритмов, обеспечивая анализ влияния каждого входного признака на прогнозируемые результаты, что позволяет улучшить понимание модели и качество ее предсказаний. Понимание значимости признаков особенно важно для решения рассматриваемой задачи, так как полученные выводы могут быть использованы для улучшения экспериментальных установок, выбора новых объектов исследования и оптимизации алгоритмов.

1. ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Целью настоящей работы являлось сравнение эффективности различных способов анализа существенности входных признаков для нейронных сетей на примере задачи определения состава газовых смесей по данным полупроводниковых сенсоров.

Для достижения поставленной цели ставились следующие *основные задачи*:

1. Получение базовых результатов – нейросетевого решения рассматриваемой задачи на полном наборе входных признаков.
2. Оценка существенности входных признаков при помощи нижеперечисленных методов: метод анализа весов нейронной сети (МАВНС), метод перемешивания значений входных признаков (МПЗВП), метода фиксации значений входных признаков (МФЗВП), метода глубокого разложения Тейлора (МГРТ).
3. Отбор признаков на основе полученных значений существенности и формирование наборов данных со сниженной входной размерностью.
4. Обучение нейронных сетей на сформированных наборах данных и оценка качества решения задачи.
5. Анализ полученных результатов и формулирование выводов относительно оптимального метода оценки существенности входных признаков.

2. ПОСТАНОВКА ФИЗИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

2.1. ЭКСПЕРИМЕНТ

Экспериментальные данные, используемые в данном исследовании, были получены в лаборатории химии и физики полупроводниковых и сенсорных материалов на химическом факультете МГУ под руководством ст.н.с., к.х.н. В.В. Кривецкого.

В ходе эксперимента проводились измерения и запись данных с газовых датчиков (сенсоров) для мониторинга атмосферного воздуха с целью обнаружения утечек водорода и пропана. Использовался синтез газочувствительных материалов с помощью одностадийного метода пиролиза с распылением пламени для изготовления датчиков. В настоящем исследовании были использованы четыре различных независимых датчика на основе SnO_2 .

Датчики помещали в изолированную проточную камеру из политетрафторэтилена. Поток воздуха отбирался снаружи здания химического факультета МГУ через трубку из ПТФЭ, с установленной линейной скоростью 0,2 м/с, снабженную керамическим пылевым фильтром с помощью мембранныго вакуумного насоса (Рис. 1). Наружный поток был зафиксирован с помощью дроссельной заслонки. Газовые баллоны использовались для добавления газов с помощью регуляторов расхода. Генератор чистого воздуха использовался для подачи воздуха, разбавления потока углеводородов, а также для формирования потока воздуха через камеру датчика без примеси водорода или пропана. Газы смешивались с воздушным потоком через капиллярную трубку с фиксированной скоростью, поддерживаемой контроллерами массового потока. Общий поток через газовую камеру всегда оставался неизменным.

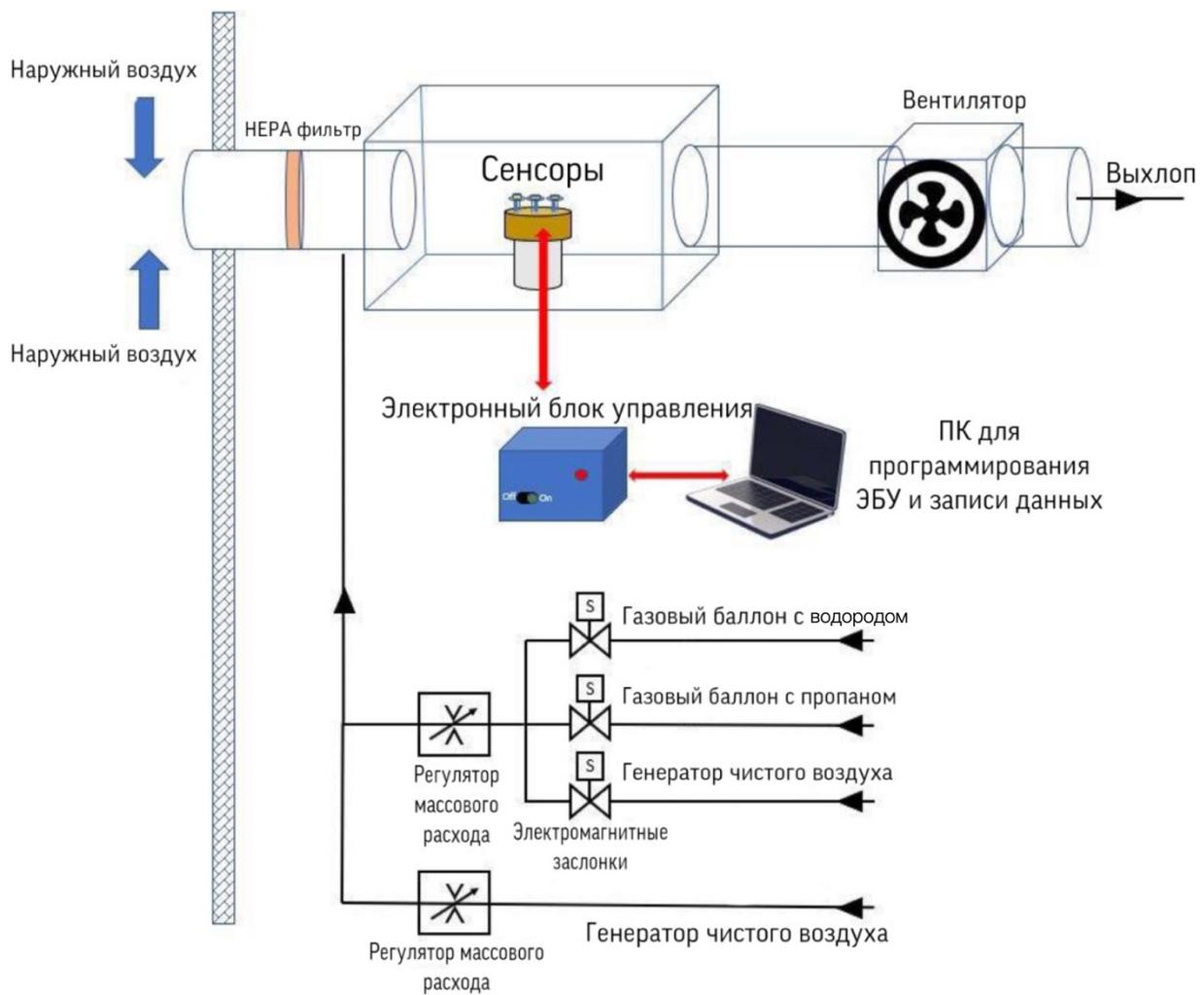


Рис.1. ЛАБОРАТОРНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ РАБОТЫ ГАЗОВОГО ДАТЧИКА НА ОСНОВЕ ОКСИДА МЕТАЛЛА В ИМИТИРУЕМЫХ УСЛОВИЯХ ПРОМЫШЛЕННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ С ЦЕЛЬЮ ОБНАРУЖЕНИЯ ВОДОРОДА И ПРОПАНА.

Смешивание газов (Рис. 2) продолжалось 12 часов и состояло из трех этапов по 1 час каждый с поступлением газа в заданной концентрации как для водорода, так и для пропана. Каждая стадия поступления газа отделялась от следующей потоком окружающего воздуха в течение 1 ч. Приготовление газовой смеси было полностью автоматизировано с использованием контроллеров массового расхода и заслонок, управляемых специальным программным обеспечением для ПК.

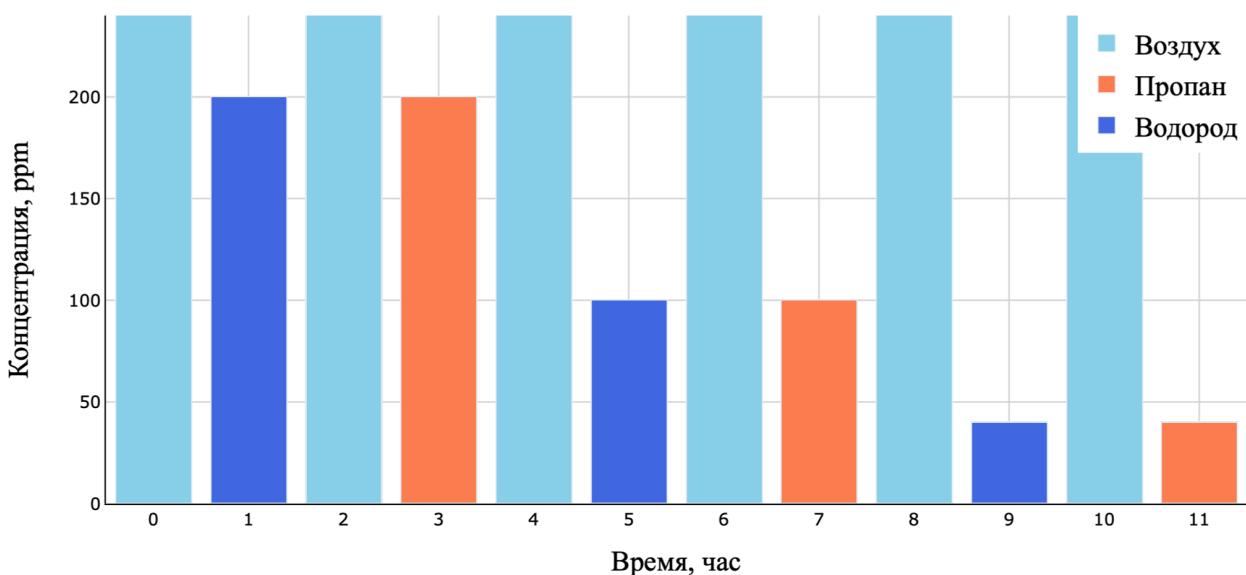


Рис.2. Типичный протокол смещивания газов

Датчики работали в режиме модуляции рабочей температуры, с линейными ступенями нагрева и охлаждения и стабильными температурными интервалами 5 секунд при низкой и высокой температуре (Рис. 3). Верхнее значение температуры было установлено равным 500°C для всех 4 датчиков, а нижнее - равным 150 °C. Стадия нагрева длилась 35 секунд, охлаждения – 15 секунд. Таким образом, один цикл модуляции температуры длился 60 секунд.

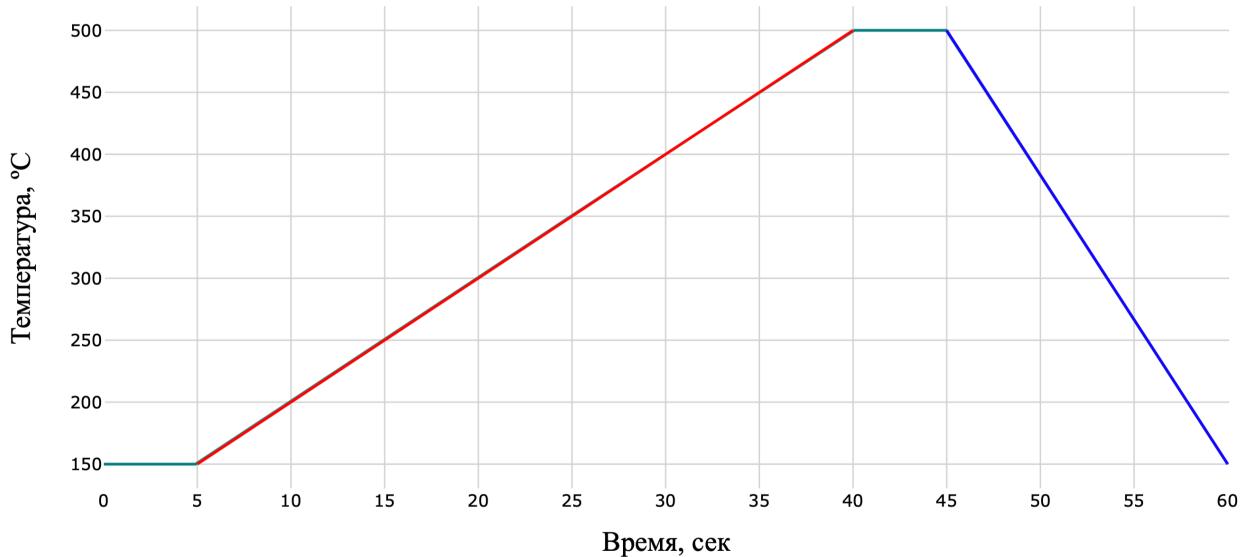


Рис. 3. Изменение температуры за один цикл

Сопротивление чувствительного слоя измерялось в режиме постоянного тока смещения калиброванной цепью делителя напряжения с частотой 10 Гц; каждая запись цикла модуляции состоял из 550 точек данных, содержащих значения времени, фактической температуры и сопротивления датчика (Рис. 4). Для реализации программы режима работы датчика и сбора данных использовался лабораторный электронный блок управления, использующий

схему делителя напряжения для измерения сопротивления слоя зондирования, которая была откалибрована перед экспериментом.

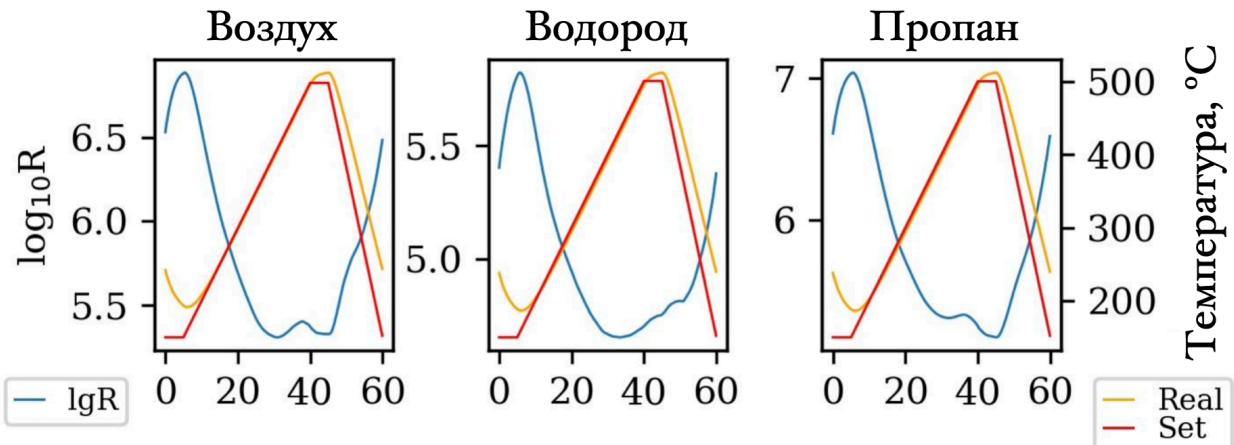


Рис. 4. КРИВЫЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ ДАТЧИКА И ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ЗА ОДИН ЦИКЛ

Примененный протокол смешивания газа позволил получить 60 циклов измерений концентрации газа при каждом запуске и во временном интервале 12 часов, что позволило регистрировать данные как о краткосрочных, так и о долгосрочных изменениях в городской атмосфере. Измерения проводились либо в течение нескольких дней подряд, либо с несколькими дневными интервалами между ними.

2.2. ДАННЫЕ

В общей сложности сбор данных проводился в течение 12 дней двумя сериями измерений: в марте и в апреле.

В результате для каждого из сенсоров (датчиков) было получено 4366 циклов измерения атмосферного воздуха и воздуха с примесью пропана или водорода: 2950 циклов измерения в 6 разных концентрациях для каждого газа – 100 ppm, 400 ppm, 470 ppm, 800 ppm, 950 ppm, 1600 ppm; и 1416 циклов измерений в концентрациях – 30 ppm, 50 ppm, 200 ppm, 350 ppm, 450 ppm, 550 ppm.

Использовалось два способа разделения исходного набора данных на тренировочный, тестовый и валидационные наборы для применения модели НС (см. раздел 4.1). В одном случае, первая часть, собранная в марте, была использована для обучения алгоритмов обработки данных (тренировочный и валидационный наборы). Вторая часть, собранная в апреле и полностью независимая от обучающего набора, была использована для тестирования разработанных моделей обработки данных. В другом случае, разделение на наборы производилось случайным образом: на тренировочный набор

отводилось 60% от полного набора данных, на тестовый и валидационные наборы – по 20%.

В работе рассматривалась регрессионная постановка задачи, где по данным динамики сопротивления одного сенсора производилось определение значений концентраций каждого из газов. С целью получения универсальной модели, не зависящей от типа и от конкретного экземпляра сенсора, отклики каждого из четырех сенсоров добавлялись в выборку данных как отдельные тренировочные примеры, что также позволило увеличить количество примеров в 4 раза. При этом итоговой размер выборки данных составил 17464 примера.

Несмотря на то, что отклики сенсоров представляют собой отрезки временных рядов, сами циклы модуляции можно рассматривать как статические паттерны, где каждой точке временного ряда соответствует четко определенное значение задаваемой температуры на температурной кривой. Исходя из этого было решено отказаться от рекуррентных архитектур нейронных сетей [6] в пользу классических многослойных персепtronов [7], поскольку обучение рекуррентных нейронных сетей более требовательно к подбору гиперпараметров и режимов обучения, а выгода от их использования в данном случае не очевидна. В то же время для классических многослойных персепtronов можно отметить доказанную теорему об универсальности аппроксимации [8], [9], [10], что делает оправданным их применение для регрессионного типа задач.

3. ОБЗОР ИСПОЛЬЗУЕМЫХ МЕТОДОВ

Методы машинного обучения при решении некоторых задач имеют преимущество перед традиционными методами обработки данных, поскольку они не требуют заранее заданных моделей для решения проблем и могут быть применены для любого типа данных. Недостаток методов машинного обучения заключается в том, что они могут быть трудными для интерпретации, и несмотря на уровень прогресса, по-прежнему мало известно о внутреннем функционировании и поведении моделей НС, а также о том, как они достигают высокой эффективности. Без четкого понимания того, как и почему они работают, разработка более совершенных моделей сводится к методу проб и ошибок [11]. Таким образом, дальнейшее исследование и разработка методов для повышения эффективности и достоверности НС остается важным направлением работы.

Решаемая в данной работе задача по своему типу является *задачей нелинейной регрессии*. В такой задаче необходимо построить модель, аппроксимирующую поведение рассматриваемой неизвестной зависимости, которая представляет собой скалярную функцию многих переменных. Значения функции известны лишь для некоторого числа точек. Из-за нелинейности функции задача аппроксимации традиционными методами может стать сложной. Однако применение ИНС позволяет решить такие задачи, путем обучения сети на наборе данных, содержащем входные и соответствующие им выходные значения переменных. Обученная ИНС может использоваться для прогнозирования выходных значений на основе новых значений входных переменных.

3.1. ИСКУССТВЕННЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

3.1.1. ТОПОЛОГИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И ПРОЦЕСС ОБУЧЕНИЯ

Рассмотрим составляющие НС. Основным элементом НС является формальный нейрон, являющийся структурной единицей обработки информации в нейронной сети. Он имеет несколько входов, значения которых он взвешивает, и одного выхода, значение которого является результатом вычислительной операции. На Рис. 5 показана схема формального нейрона, состоящая из следующих элементов.

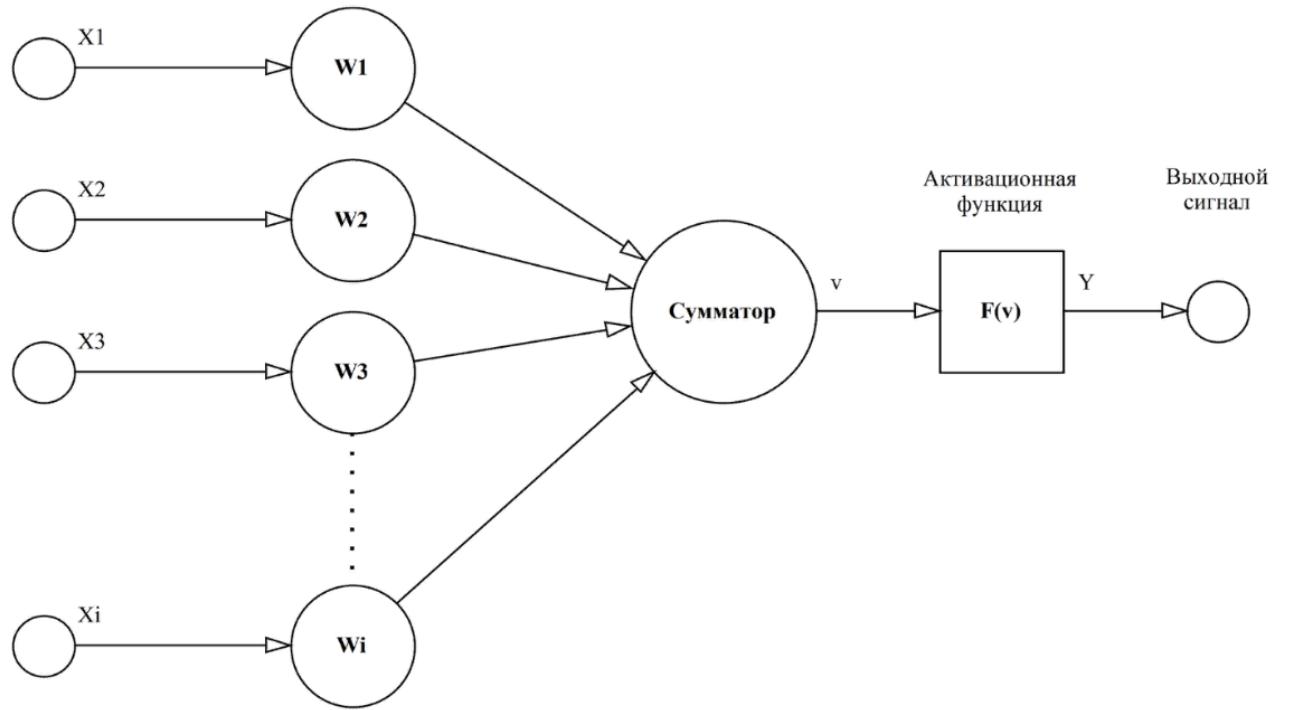


Рис. 5. СХЕМА ФОРМАЛЬНОГО НЕЙРОНА

- $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ – входные сигналы.
- Каждому нейрону соответствуют $n + 1$ действительных чисел w_i , называемых весами нейрона: $W = \{w_0, \dots, w_n\}$.
- Сумматор – вычисляет скалярное произведение вектора входного сигнала X на вектор весов W . Сумматор имеет $n+1$ входов, $x_0 \equiv 1$.
- $F(v)$ – функция активации (передаточная функция) – преобразует полученную сумму, ограничивая амплитуду выходящего сигнала; Y – выходной сигнал нейрона.

Таким образом, в математическом представлении функционирование нейрона можно описать следующей парой уравнений:

$$v = \sum_{i=1}^n w_i x_i + w_0 \quad (1)$$

$$Y = F(v) \quad (2)$$

Величина v является взвешенной суммой входных сигналов; w_0 – величина, подаваемая на нулевой вход сумматора и соответствующая весу постоянного единичного сигнала, называется смещением.

Чаще всего для реализации нелинейного преобразования $F(v)$ используют следующие функции (Рис. 6):

- Линейная функция:

$$F(x) = kx \quad (3)$$

- Линейный выпрямитель (ReLU):

$$F(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ x, & x \geq 0; \end{cases} \quad (4)$$

- Линейный выпрямитель с “утечкой” (Leaky ReLU):

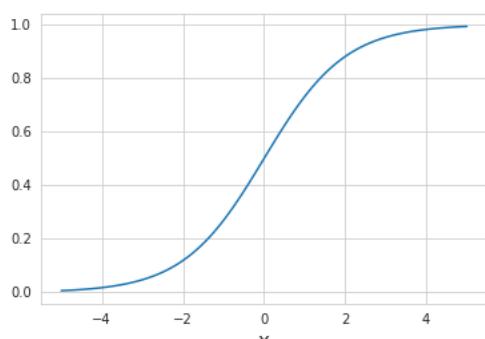
$$F(x) = \begin{cases} ax, & 0 < a < 1; x < 0; \\ x, & x \geq 0; \end{cases} \quad (5)$$

- Сигмоидальная (логистическая) функция:

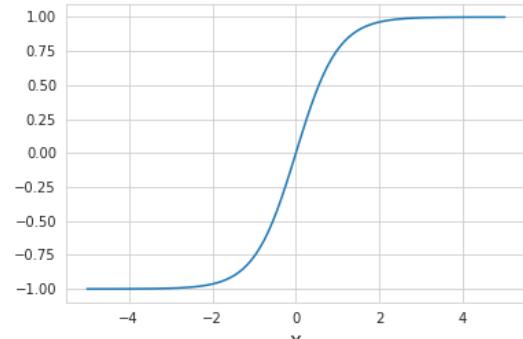
$$F(x) = \frac{1}{1 + \exp(-ax)} \quad (6)$$

- Гиперболический тангенс:

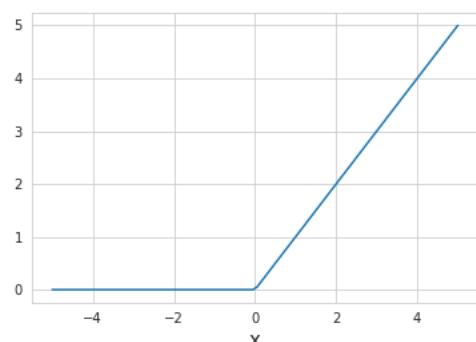
$$F(x) = \tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} \quad (7)$$



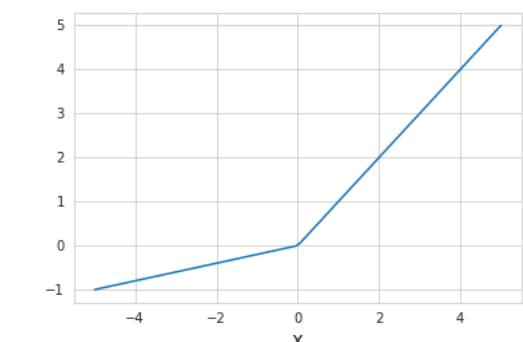
Сигмоидальная функция



Гиперболический тангенс



Линейный выпрямитель (ReLU)



Линейный выпрямитель с “утечкой” (LEAKY RELU)

Рис. 6. ПРИМЕРЫ РАЗЛИЧНЫХ ФУНКЦИЙ АКТИВАЦИИ

Следующим значимым термином является концепция слоя нейронов. Допустим, у нас есть вектор X с размерностью p , который мы передаем в N_h нейронов параллельно. Каждый нейрон обрабатывает входные данные и рассчитывает выход, всего N_h выходов. Группа таких нейронов составляет слой. Вектор, полученный на выходе слоя, можно передать следующему слою, что позволяет создавать многослойные нейронные сети. В НС типа многослойный персептрон различают входной, скрытые и выходной слои. Выходной слой создает ответ сети. В случае задачи классификации каждый выходной нейрон соответствует одному из классов. Нейроны входного слоя не преобразуют данные, они лишь формируют вектор входных признаков и передают его следующему слою. (Рис. 7)

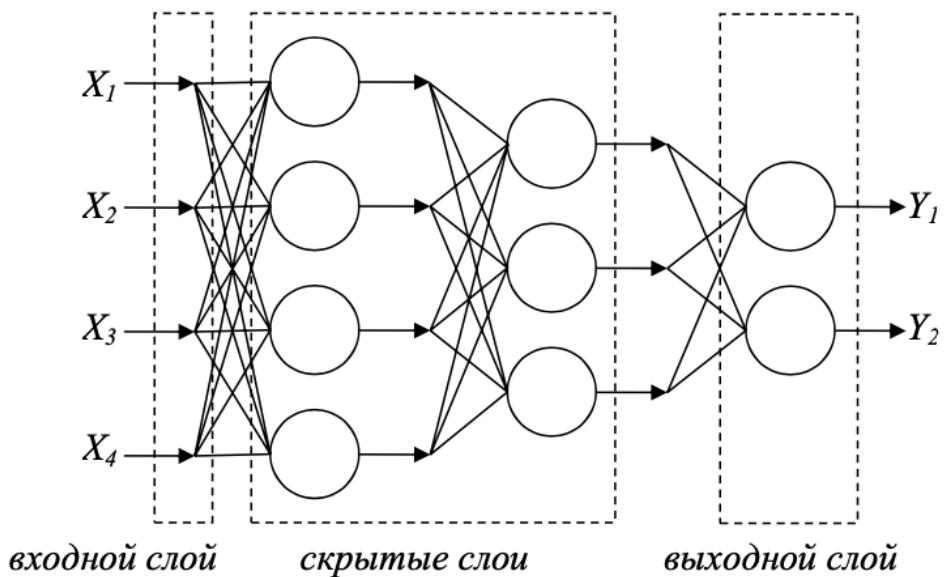


Рис. 7. СХЕМА ИНС ПРЯМОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ С ДВУМЯ СКРЫТЫМИ СЛОЯМИ

Для описания зависимости между выходными и входными данными необходимо настроить параметры нейронной сети, а именно веса и смещение каждого из нейронов. От подбора оптимальных параметров зависит точность работы сети в решении задач. Среди методов оптимизации для решения данной задачи наибольшей популярностью пользуются градиентные методы первого порядка. Использование градиентных методов основывается на определении функции потерь (ошибки) на одном примере $L_i(\hat{f}(X_i, w), y_i)$. Функция ошибки на всех примерах равна $\sum L_i$. С использованием введенной функции потерь происходит обновление весов НС методом градиентного спуска. В соответствии с методом градиентного спуска, новое значение некоторого веса w определяется по формуле, где η – параметр скорости обучения:

$$w_{(t+1)} = w_t - \eta \frac{\partial \sum L_i}{\partial w_t} \quad (8)$$

Однако, вычисление $\sum L_i$ на большом объеме обучающей выборки является слишком громоздким. Также при подстройке весов с использованием функции потерь, вычисленной по всем примерам, чаще возникает проблема "застривания" оптимизации в локальных минимумах функции ошибки. Для ее смягчения используется стохастический градиентный спуск [12]:

$$w_{(t+1)} = w_t - \eta \frac{\partial L_i}{\partial w_t} \quad (9)$$

то есть подстройка весов осуществляется после предъявления каждого примера или группы (пакета) примеров. Каждая итерация градиентного спуска называется тренировочным событием, а количество тренировочных событий, равное количеству примеров в обучающей выборке, называется эпохой. Для эффективного применения градиентных методов в нейронных сетях необходимо рассчитывать градиент в каждой точке. Для этого используется алгоритм обратного распространения ошибки [13]. Производная функции ошибки по одному из весов определяется через производную выходного слоя, который зависит от значений вектора предыдущего слоя: $\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial L}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial w}$

Алгоритм состоит из двух этапов: прямого и обратного прохода (распространения). Во время прямого прохода рассчитываются активации каждого нейрона в сети и ошибка на выходе сети в целом. Обратный проход позволяет вычислить градиент этой ошибки и последовательно пересчитать его на выходы предыдущих слоев с целью подстройки весов во всех слоях сети.

3.1.2. ПРОБЛЕМЫ ПОСТРОЕНИЯ НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ

Основным достоинством НС является гибкость в аппроксимации зависимостей самого разного рода. Однако, могут возникать некоторые проблемы, такие как склонность к переобучению при неправильной организации процесса обучения, необходимость наличия представительных наборов данных достаточно большого размера и трудность в интерпретации решений, принимаемых нейросетью.

В процессе обучения НС вначале усваивает общие закономерности, характерные для всех данных. Однако на какой-то стадии обучения сеть начинает усваивать особенности, характерные только для тренировочного набора данных, а ошибка на независимых данных начинает возрастать – сеть переучивается. Критерий определения необходимого для тренировки сети количества эпох является важным вопросом при построении нейросетевой модели. Для контроля качества обобщения нейросети обычно используется остановка обучения поциальному валидационному набору данных, который должен быть представительным и не иметь общих примеров с тренировочным и тестовым наборами. Ошибка на валидационном наборе данных $L_t^{(v)}$ измеряется на каждой эпохе обучения и обучение останавливается, если в течение заданного количества эпох ошибка не улучшится. Подобный приём

является весьма эффективным средством для предотвращения переучивания НС.

При построении нейросетевой модели возникает также проблема, связанная с чувствительностью нейросетей к размерностям входного и выходного наборов данных. Это обусловлено сложностями поиска оптимального значения параметра в пространстве весов нейросетей, размерность которого может быть очень большой. Также существует проблема в необходимости подбора параметров архитектуры сети, таких как число скрытых слоев или число нейронов в скрытом слое. Чем выше размерность данных, тем сложнее подобрать оптимальные параметры архитектуры сети, и тем выше опасность переучивания. Одним из подходов для решения данных проблем состоит в понижении размерности входных данных.

3.2. ПОНЯТИЕ РАЗМЕРНОСТИ ДАННЫХ И ИХ ПОНИЖЕНИЕ

При обсуждении *размерности данных* можно говорить о размерности конкретного набора данных или о размерности задачи в целом. В данной работе рассматривается *размерность конкретного набора данных*, где размерность набора данных относится к минимальному значению d из возможных значений размерности, при котором производный набор из N точек d -мерного пространства успешно решает задачу с точностью, не хуже, чем исходный набор из N точек k -мерного пространства ($k > d$). Проблема понижения размерности данных возникает, когда система эффективно работает в пространстве размерности не выше N , но размерность пространства входных данных M выше или существенно выше

Входная информация может содержать шум или избыточные признаки, что отрицательно влияет на качество решения задачи. Кроме того, понижение размерности помогает бороться с рядом проблем:

Проблема «проклятия размерности» [14] заключается в том, что при увеличении размерности пространства d количество данных, необходимых для достаточной выборки, экспоненциально возрастает, то есть, при увеличении количества признаков, необходимое количество данных для достаточной выборки растет очень быстро, что делает задачи анализа данных более сложными и требует больших вычислительных мощностей.

Проблема интерпретации исходных данных обычно связана с трудностью выявления зависимостей между измеренными данными и реальным объектом изучения.

Проблема получения исходных данных. Получение начальных данных может быть неоднородным в распределении входных характеристик, что сильно влияет на их анализ.

3.3. МЕТОДЫ ПОНИЖЕНИЯ РАЗМЕРНОСТИ ДАННЫХ

Выделяются две взаимодополняющие группы методов, которые применяются в области понижения размерности данных [15]:

- Отбор наиболее существенных входных признаков из полного набора имеющихся (*Feature Selection*).
- Конструирование новых входных признаков на базе существующего набора (*Feature Extraction*).

В данной работе рассматриваются методы анализа существенности входных признаков (МАСВП), которые затем используются для отбора наиболее существенных признаков, т.е. для реализации методов класса Feature Selection.

Существует следующая общепринятая классификация методов отбора признаков [16]:

Фильтры (Filters) – это методы, оценивающие существенность каждого из признаков, используя для этого только характеристики самих данных.

Обертки (Wrappers) – методы, основанные на обучении целевого алгоритма решения задачи на подмножествах признаков и выборе подмножества, удовлетворяющего заданному критерию, то есть при наличии N входных признаков возможно перебрать $2^N - 1$ различных наборов входных признаков.

Встроенные методы (Embedded) – методы, для которых отбор признаков естественным образом встроен в сами алгоритмы обучения.

Особенности алгоритмов:

- Вычислительные затраты могут существенно зависеть от числа входных признаков (наиболее характерно для оберток).
- Низкая контрастность при большом числе входных признаков, за счет присутствия мультиколлинеарности и шумовых признаков (в основном характерно для фильтров и встроенных методов).
- Существует возможность повышать статистическую точность результатов алгоритма, тренируя большее число нейронных сетей и усредняя результаты (в основном для встроенных методов).
- Возможно многоэтапное применение алгоритмов (использование для последовательного прореживания набора входных признаков – для встроенных методов).

Ввиду особенностей решаемой задачи в данной работе рассматривались встроенные методы отбора для нейронных сетей.

3.4. ПОНЯТИЕ СУЩЕСТВЕННОСТИ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

В случае встроенных методов отбора для НС существенность входного признака $R(X_i)$ характеризует степень того, насколько сильно меняется качество получающейся нейросетевой модели, если данный признак X_i используется или не используется при построении модели. Стоит отметить, что существенность признака $R(X_i)$, определенная таким образом, обладает следующими свойствами:

- Существенность всегда определяется применительно к конкретной рассматриваемой задаче, т.е. связана с её выходными признаками.
- Существенность определяется применительно к рассматриваемому набору данных. Незначительная зависимость существенности входного признака от конкретного набора измеренных данных дает возможность сделать вывод, что существенность признака определяется некоторыми закономерностями, присущими именно задаче, а не конкретной выборке измеренных данных. Чем объемнее, полнее и представительнее выборка измеренных данных, на основе которой рассчитывается существенность, тем вероятнее получение значений существенности входных признаков, слабо зависящей от выборки данных.
- Значение $R(X_i)$ является действительным числом.

В сложных задачах некоторые признаки должны рассматриваться вместе; исключение одного признака из рассмотрения может сделать бессмысленным рассмотрение остальных сопутствующих. Примером служит моделирование зависимости $y = x_1 * x_2$, то есть признаки так или иначе могут быть взаимосвязаны, в этих случаях существенность каждого признака можно определить лишь с точки зрения приведенного формального определения. Поэтому, существенность признака определяется еще и полным набором использованных при построении модели признаков.

3.4.1. АЛГОРИТМЫ ОЦЕНКИ СУЩЕСТВЕННОСТИ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

Существует множество алгоритмов оценки существенности входных признаков в наборе данных, основанных на корреляционном анализе [17], кросс-энтропийном анализе [18], линейной регрессии [19], [20], нейронную сети с общей регрессией [21], анализе весов нейронной сети [22] и др. В данной работе мы остановимся только на последнем из них – анализе весов нейронной сети, а также ознакомимся с более современным методом, в сравнении с более простыми референсными алгоритмами оценки.

3.4.1.1. МЕТОД ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

Метод перемешивания значений входных признаков (МПЗВП) представляет собой метод для оценки важности признаков в модели НС путем нарушения отношения между признаком и целевой переменной с измерением изменения качества модели. Признаки, которые являются важными для модели, будут влиять на выходной результат и иметь большой вклад в точность, а признаки, являющиеся менее важными или дублирующимися, будут иметь меньший вклад после случайного изменения значений входных параметров. Для каждого признака поэтапно выполняются следующие операции:

1. Случайным образом осуществляется перестановка значений x_j признака в наборе данных, нарушая зависимость между признаком и целевой переменной, с получением нового квази-признака x_j^{shuf} .
2. Производится вычисление значение существенности признака с помощью статистических метрик качества:

$$R_{ik} = MAE(y_k(x_1, \dots, x_j^{shuf}, \dots, x_n), d_k) \quad (10)$$

Здесь y_k – ответ сети, d_k – истинное значение целевой переменной.

3. Рассчитывается оценка силы влияния с помощью измерения разницы между качеством работы модели на измененной выборке и качеством работы модели на оригинальной выборке.

Особенности алгоритма:

- Оценка важности признаков не зависит от выбора архитектуры нейронной сети или метода обучения.
- Распределение значений тестируемого признака не изменяется, а значит, не изменяется приносимое данным признаком количество информации. Однако нарушается релевантность этой информации решаемой задаче.
- Возможность переоценки существенности признаков, которые на самом деле являются шумом.
- Малая степень стабильности при малых размерах тестового набора данных.
- Зависимость результатов от конкретной метрики качества.

МПЗВП может быть полезен для неинформативных или слабо коррелирующих с целевой переменной признаков, которые могут негативно влиять на качество модели.

3.4.1.2. МЕТОД ФИКСАЦИИ ЗНАЧЕНИЙ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

Метод фиксации значений входных признаков (МФЗВП) является также одним из методов для оценки существенности входного признака при его изменении. Данный метод может помочь выявить потенциальные взаимодействия между переменными. Алгоритм состоит из следующих применяемых поэтапно операций:

1. Фиксация значения одного или нескольких изучаемых признаков x_j . Например, равным среднему значению x_j^{mean} этого признака на тренировочном наборе данных.
2. Производится вычисление значение существенности признака с помощью статистических метрик качества:

$$R_{ik} = MAE(y_k(x_1, \dots x_j^{mean}, \dots x_n), d_k) \quad (11)$$

Здесь y_k – ответ сети, d_k – истинное значение целевой переменной.

3. Рассчитывается оценка силы влияния с помощью измерения разницы между качеством работы модели на измененной выборке и качеством работы модели на оригинальной выборке.

Особенности алгоритма в основном аналогичны особенностям МПЗВП, за тем исключением, что распределение значений тестируемого признака изменяется таким образом, что его информативность становится равной 0.

3.4.1.3. МЕТОД АНАЛИЗА ВЕСОВ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Метод анализа весов нейронной сети (МАВНС) – это семейство алгоритмов, которые позволяют оценить существенность входных признаков на основе весов обученного многослойного персептрона. Существуют модификации данного семейства, описанные в работах [22], [23], [24]. Рассмотрим классический метод [25], используемый в данной работе.

Значения существенности входного признака с номером i относительно выходного признака с номером k оцениваются следующим образом:

$$R_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^M |w_{ij}w_{jk}|}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M |w_{ij}w_{jk}|} \quad (12)$$

При этом значения R_{ik} являются неотрицательными и сумма существенностей всех признаков равна единице $\sum_{i=1}^N R_{ik} = 1$. Введены следующие обозначения: N – число нейронов входного слоя сети, совпадает с размерностью входных данных; M - число нейронов скрытого слоя сети; w_{ij} – элемент матрицы весов

скрытого слоя сети (значение веса между i-ым нейроном входного слоя и j-ым нейроном скрытого слоя); w_{jk} – элемент матрицы весов выходного слоя сети (значение веса между j-ым нейроном скрытого слоя и k-м нейроном выходного слоя) (Рис. 8).

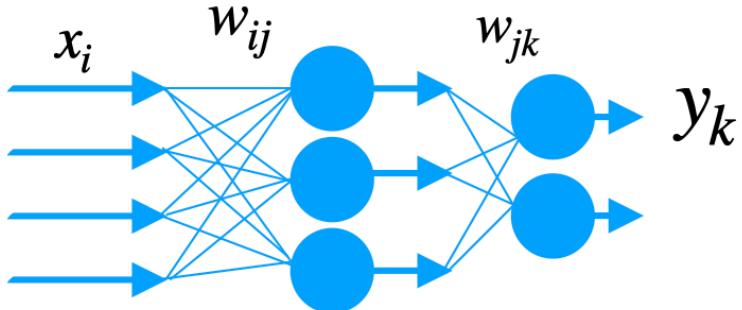


Рис. 8. СХЕМА АКТИВАЦИИ ВЕСОВ

Особенности алгоритма:

1. Вычислительные затраты существенно зависят от числа входных признаков.
2. Наиболее часто алгоритмы данного класса используются для нейронных сетей с 1 скрытым слоем.
3. Алгоритмы легко обобщаются на случай сетей с большим числом скрытых слоёв.
4. Контрастность получаемых значений существенности тем хуже, чем больше число входных признаков. Засорение шумовыми переменными исходного набора входных признаков чрезвычайно снижает качество результата применения алгоритма.
5. Контрастность получаемых значений существенности резко падает с повышением сложности сети.
6. Существует возможность повышать статистическую точность результатов алгоритма, тренируя несколько нейронных сетей с одинаковой архитектурой и усредняя результаты.
7. Алгоритм позиционируется как оценочный, возможно использование быстрых алгоритмов обучения нейронных сетей.
8. Возможно многоэтапное применение алгоритма (использование для последовательного прореживания набора входных признаков).

3.4.1.4. МЕТОД ГЛУБОКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ТЕЙЛORA

Нелинейные методы являются золотым стандартом сложных задач машинного обучения: классификация изображений, обработка естественного языка, распознавание речи. Несмотря на удобство, у них есть весомый минус – неясно, как именно они приходят к определенным решениям, что очень мешает анализу и пониманию рассуждения сети [26]. *Метод глубокого разложения Тейлора* (МГРТ) помогает разобраться в нелинейных решениях НС с помощью метода декомпозиции решения, осуществляемого путем

обратного распространения, основанного на разложении функции выхода НС по формуле Тейлора по активациям нейронов входного слоя сети (Рис. 9).

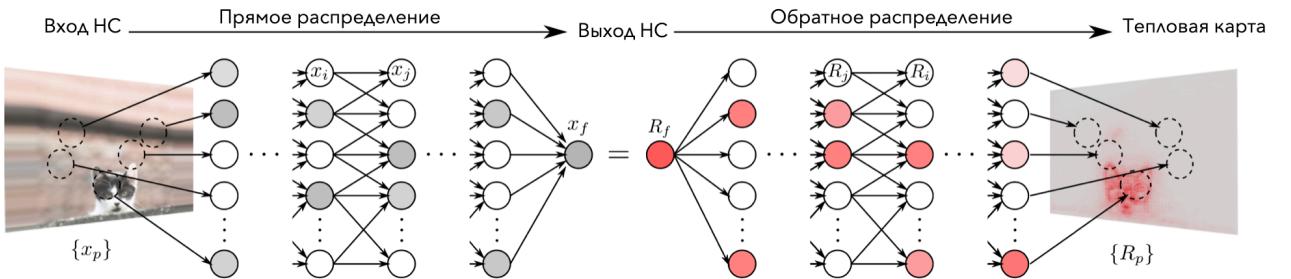


Рис. 9. ГРАФИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ R

Для решения сети x_f вводится локальная функция *релевантности* R_f . Каждый нейрон имеет свою функцию релевантности R_i , которая определяет влияние нейрона на значение целевой функции. Декомпозиция решения происходит путем разложения функции выхода нейронной сети по формуле Тейлора. Каждый нейрон входного слоя сети представляет собой активационную функцию, вычисляющую линейную комбинацию входов и весов нейрона. При обратном распространении вычисляется первый порядок приближения функции выхода по формуле Тейлора. Затем каждый нейрон входного слоя выступает в роли функции релевантности, определяющей вклад данного нейрона в целевую функцию. Веса нейронов складываются с учетом значений релевантностей, определяющих значение целевой функции. Данное разложение фактически соответствует процедуре обратного распространения ошибки, и может быть последовательно выполнено для произвольного количества слоев сети (отсюда и возникло название – «глубокое» разложение Тейлора). В результате после выполнения этой процедуры локальная функция релевантности R приводит на входном слое к результатам декомпозиции решения на отдельные компоненты, которые могут быть рассмотрены независимо, в качестве значений существенности входных признаков, формирующих тепловую карту, визуализирующую решение сети. Эта процедура иллюстрируется на Рис.9 для случая построения нейросетевого классификатора.

Рассмотрим однослойную полносвязную нейронную сеть следующей архитектуры: (Рис. 10)

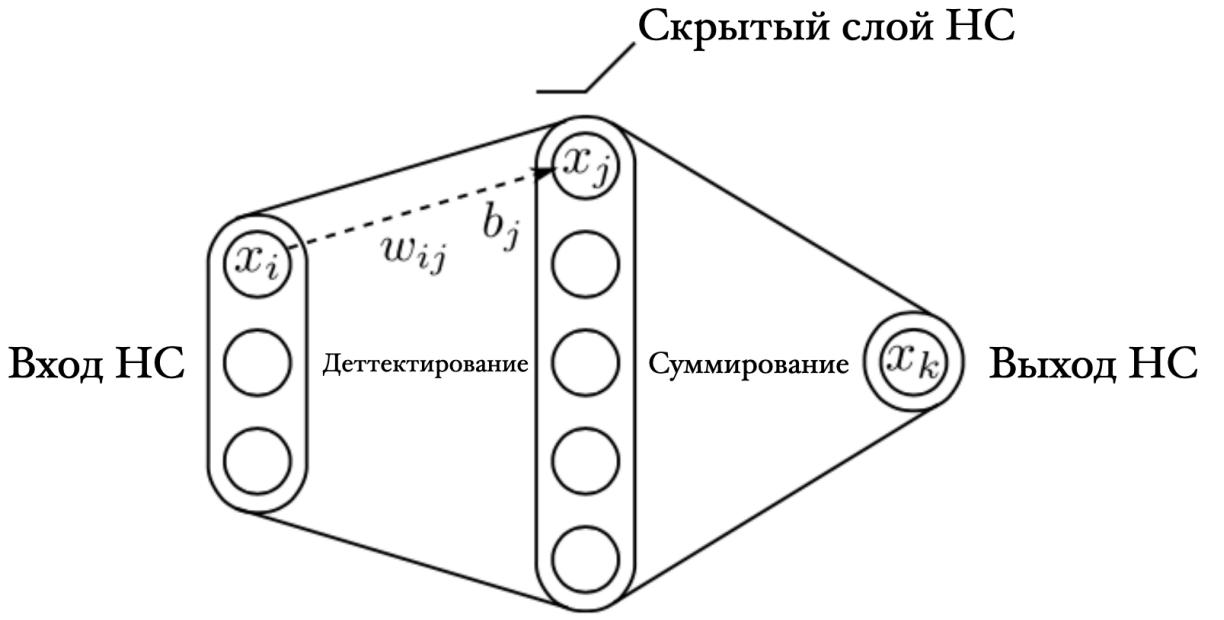


Рис.10.АРХИТЕКТУРА однослойной Нейронной Сети

Каждый нейрон с номером j единственного скрытого слоя вычисляет взвешенную линейную комбинацию своих входов, к которым применяется нелинейная функция активации. Сигнал на выходе нейрона скрытого слоя и на выходе сети определяется формулами:

$$x_j = F\left(\sum_i^N x_i w_{ij} + b_j\right) \quad (13)$$

$$x_k = \sum_j x_j$$

где x_k – выходной сигнал, F – нелинейная монотонно возрастающая функция активации, w_{ij} – вес, связывающий нейрон i входного слоя с нейроном j скрытого слоя, b_j – член смещения.

Используем разложение Тейлора:

$$f(x) = f(\tilde{x}) + \frac{f'(\tilde{x})}{1!}(x - \tilde{x}) + \frac{f''(\tilde{x})}{2!}(x - \tilde{x})^2 + \dots + \frac{f^n(\tilde{x})}{n!}(x - \tilde{x})^n \quad (14)$$

Тогда первый порядок приближения функции по формуле Тейлора:

$$f(x) = f(\tilde{x}) + \frac{f'(\tilde{x})}{1!}(x - \tilde{x}) = f(\tilde{x}) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=\tilde{x}}(x - \tilde{x}) \quad (15)$$

где корневая точка разложения является точкой $f(\tilde{x}) = 0$.

Выполнив разложение функции выхода НС по формуле Тейлора, приравняем прогнозируемый результат к функции *релевантности* R_k :

$$f(x) = f(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^k \left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_{x=\tilde{x}_l} (x_i - \tilde{x}_l) \approx 0 + \sum_{i=1}^k \left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_{x=\tilde{x}_l} (x_i - \tilde{x}_l) \quad (16)$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^k R_k$$

Релевантность для нейронов выходного слоя теперь может быть выражена в терминах релевантности нейронов скрытого слоя:

$$R_k = \sum_j^m R_j \quad (17)$$

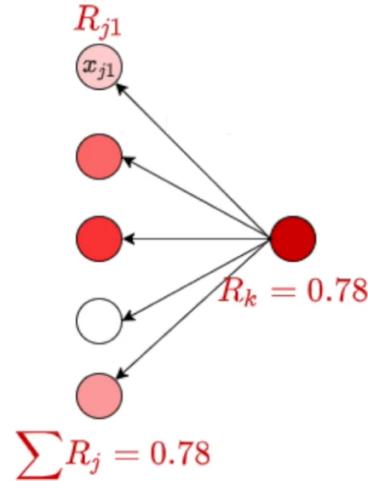


Рис.11.РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИИ РЕЛЕВАНТНОСТИ ВЫХОДНОГО СЛОЯ

Получим, что перераспределенные в обратном направлении функции релевантности R_j могут быть записаны как:

$$R_{j1} = \left. \frac{\partial R_k}{\partial x_{j1}} \right|_{(\tilde{x}_1)} (x_{j1} - \tilde{x}_{j1}) \quad (18)$$

$$R_j = \sum_{j=1}^m \left. \frac{\partial R_k}{\partial x_{j1}} \right|_{(\tilde{x}_1)} (x_{j1} - \tilde{x}_{j1})$$

Аналогично для i -го нейрона входного слоя:

$$\sum_i R_i = \sum_i \sum_j \left. \frac{\partial R_j}{\partial x_i} \right|_{(\tilde{x}_i)} (x_i - \tilde{x}_i) \quad (19)$$

В итоге метод с помощью значения локальной функция релевантности R_i входного слоя определяет значения существенности входных признаков, с помощью которых создает тепловую карту, объясняющую, почему классификатор НС выбрал конкретное решение, то есть тепловая карта является результатом глубокого разложения Тейлора функции выхода НС (Рис. 12).

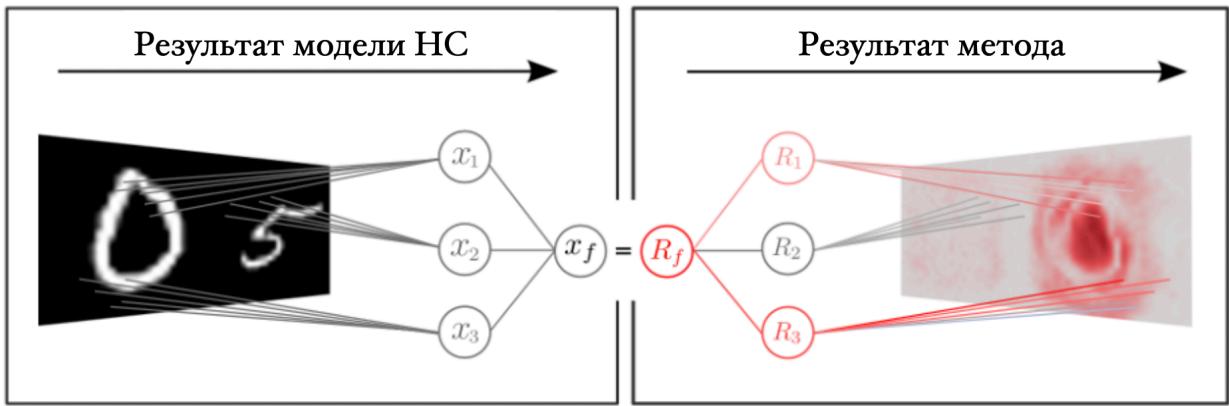


Рис.12.РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИИ РЕЛЕВАНТНОСТИ ВХОДНОГО СЛОЯ

Рассмотрено применение к сетям с одним скрытым слоем, но результат может быть так же обобщен для сетей с несколькими скрытыми слоями.

Особенности алгоритма:

1. Для получения более точных результатов необходимо вычислять производные высших порядков ряда Тейлора, что требует высоких вычислительных затрат.
2. Начальные условия влияют на точность и скорость сходимости ряда Тейлора, поэтому неправильные начальные значения могут привести к неверным результатам. Неправильное задание начальных значений может привести к слишком медленной или быстрой сходимости ряда, а также к более высокой чувствительности к шумовым данным.
3. Важен правильный выбор порядка аппроксимации, который является частичной суммой ряда Тейлора и определяет точность и скорость работы алгоритма. Выбор неоптимального порядка может привести к потере информации об исходных данных или снижению точности результатов.
4. Может быть использован для оценки существенности входных признаков как для линейных, так и для нелинейных моделей.
5. Позволяет оценить взаимодействия между различными признаками, учитывая их влияние на выходное значение модели.

3.4.2. АЛГОРИТМЫ ОТБОРА ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

Рассмотрим методы выбора наиболее важных признаков для решения задачи путем применения алгоритма отбора индивидуально или после применения алгоритмов оценки существенности входных признаков.

Существует несколько основных вариантов алгоритмов отбора существенных признаков после применения алгоритмов оценки существенности входных признаков (здесь мы не рассматриваем методы-обёртки):

1. Алгоритм отсечения по порогу
2. Алгоритм заданного числа наилучших входных признаков
3. Алгоритм множественных запусков
4. Алгоритм случайно сгенерированных признаков

3.4.2.1. АЛГОРИТМ ОТСЕЧЕНИЯ ПО ПОРОГУ

Алгоритм основан на предположении, что не все признаки равнозначны и некоторые из них могут быть неинформативными или даже негативно влиять на модель. Метод основан выборе наиболее важных признаков с помощью отсечения всех признаков, у которых значение существенности менее определенного порога. Целью алгоритма является избавление от отрицательного влияния несущественных признаков на модель, сохраняя главные характеристики данных.

Алгоритм работает следующим образом:

1. Вычисляются статистические показатели для каждого признака. Например, медиана, среднее значение, стандартное отклонение и т. д.
2. Определяется пороговое значение для отсечения признаков. Порог может быть задан заранее или рассчитан автоматически по формуле, которая учитывает статистические показатели.
3. Признаки, значения которых ниже порога, отсекаются из набора признаков.
4. Полученный набор признаков используется для обучения модели.

Кроме того, данный метод может применяться к полученной *совокупности значений существенности* $\{R(X_i)\}$ алгоритмом оценки. Рассматривается среднее значение существенности и *Average* и стандартное отклонение *std*:

$$Average = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N R(X_i) \quad (20)$$

$$std = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (R(X_i) - Average)^2 \right)^{1/2} \quad (21)$$

Согласно алгоритму, существенными будут считаться все те входные признаки, значения существенности которых выше, чем *Average*. Возможен

вариант, когда в качестве порога будет выступать значение $Average + N * std$, где $N = 1, 2$ или 3 . В данном случае N – параметр алгоритма.

Преимуществами алгоритма отсечения признаков по порогу являются более простая интерпретируемость полученных результатов и улучшение эффективности обучения модели за счет устранения малозначимых признаков из набора данных. Недостатком данного алгоритма является то, что метод может не учитывать важность признаков в контексте модели и сильно зависит от выбранного порога для отсечения. Если показатели статистики в данных не равномерны, то порог может выбираться неправильно и приводить к потере информации в наборе данных.

3.4.2.2. АЛГОРИТМ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СЛУЧАЙНО СГЕНЕРИРОВАННЫХ ПРИЗНАКОВ

В набор входных признаков включается ряд признаков со случайно сгенерированными значениями. Такие признаки называются случайно сгенерированными. Случайно сгенерированные признаки должны не иметь никакого отношения к рассматриваемой задаче. Возможно включение в рассмотрение в качестве случайных каких-либо признаков, имеющих некий смысл, но не в данной задаче, но этот вопрос требует отдельного исследования. Согласно алгоритму, существенными входными признаками будут считаться все признаки, значение существенности для которых выше, чем максимальное значение существенности по всем случайно сгенерированным признакам. Параметром алгоритма является число используемых случайно сгенерированных признаков [15], [27].

3.4.2.3. АЛГОРИТМ МНОЖЕСТВЕННЫХ ЗАПУСКОВ

Если в примененном алгоритме оценки значений существенности использовался генератор случайных чисел, и результаты получаемых значений зависят от инициализации генератора случайных чисел, проводится M применений этого алгоритма оценки, и получается M комплектов значений существенности входных признаков. Тогда, согласно рассматриваемому алгоритму, должны быть отобраны те из существенных признаков, которые $K \leq M$ раз удовлетворили одному из других алгоритмов отбора.

3.4.2.4. АЛГОРИТМ ЗАДАННОГО ЧИСЛА НАИЛУЧШИХ ПРИЗНАКОВ

После применения алгоритма оценки необходимо провести сортировку входных признаков в порядке убывания значения существенности. Далее выбрать некоторое заданное число первых признаков из этого списка.

3.4.3. СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА СУЩЕСТВЕННОСТИ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

МАСВП могут быть сравнены только на основе конкретных измеренных данных для конкретной задачи. Провести строгое сравнение методов на основе разных данных или задач практически невозможно. Можно только говорить о том, что статистический метод имеет свои преимущества и недостатки по сравнению с другими методами. Исходя из преимуществ и недостатков каждого метода, для новой задачи можно рекомендовать применять методы по очереди.

Сравнение различных МАСВП может быть выполнено следующим образом:

1. Каждый МАСВП применяется к одним и тем же условиям входных данных и параметров модели. Из исходного набора входных признаков выбираются наиболее значимые входные признаки $\{X_1 \dots X_N\}$ для каждого из методов.
2. Затем строятся нейросетевые модели (например, используя исходные параметры модели) на основе каждого отобранного набора X_i .
3. По результатам проверки предсказательных способностей моделей в независимом наборе измерений вычисляется значение функционала ошибки. Функционал ошибки может быть, например, коэффициентом линейной корреляции, средней абсолютной ошибкой, средней квадратичной ошибкой или коэффициентом детерминации.
4. Далее, для каждого набора признаков необходимо построить нейросетевую модель с одинаковыми параметрами. Это позволяет сравнивать методы на основе только выбранных признаков, а не на основе разных параметров модели.
5. После построения моделей необходимо проверить их предсказательные способности на независимом наборе измерений. Результаты проверки предсказательных способностей могут быть выражены различными функционалами ошибки.
6. После получения значений функционала ошибки для каждого метода можно сравнить их. Если значение функционала ошибки одного метода меньше, чем у другого метода, то можно сделать вывод, что этот метод более эффективен для данной задачи и выбранных признаков.

Методы могут сравниваться на основе полученных значений ошибки, поскольку все методы используются при одинаковых условиях, а значит, значения ошибки зависят только от выбранных методами признаков. Чтобы провести более строгое сравнение, рекомендуется строить несколько нейросетевых моделей при разных начальных наборах весов.

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

4.1. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПРОГНОЗОВ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Из вышеприведенных описаний работы алгоритма ясно, что, кроме всего прочего, на финальный результат используемых алгоритмов влияет случайный фактор. Например, алгоритмы оптимизации могут попадать в локальные минимумы, начальная инициализация весов нейронных сетей происходит случайным образом. Для того чтобы скомпенсировать влияние случайных величин на результаты обучения, каждый из алгоритмов применялся 5 раз для 2 способов разбиения исходного набора данных. Затем для каждой из метрик качества сети вычислялись среднее и стандартное отклонение по 5 реализациям. Это позволило оценить статистическую значимость различий в результатах применения методов.

Для оценки качества решения в настоящей работе используются следующие стандартные метрики:

- Среднеквадратичная ошибка (СКО) (Mean Squared Error, MSE):

$$MSE(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i - y_i)^2 \quad (22)$$

- Коэффициент детерминации R^2 :

$$R^2(X) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (23)$$

4.2. ПАРАМЕТРЫ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

В качестве статистической модели использовалась ИНС, реализованная в библиотеке PyTorch, которая обучалась путем минимизации функции потерь с помощью метода градиентного спуска, следующей конфигурации:

1. Многослойный персепtron с одним скрытым слоем.
2. Скрытый слой – 32 нейрона, сигмоидальная передаточная функция, скорость обучения $r = 0.001$.
3. Выходной слой – 2 нейрона, линейная передаточная функция, скорость обучения $r = 0.001$.
4. Критерий остановки обучения – невозрастание суммарной квадратичной ошибки на валидационном наборе в течение 1000 эпох.

Данные проходили линейную нормировку в интервал [0...1], коэффициенты масштабирования выбрались исходя из минимального и максимального значений каждого признака по тренировочному набору. Использовался канонический вариант процесса обучения: проводилась одна эпоха обучения,

далее подсчитывалась суммарная квадратичная ошибка сети на валидационном наборе. Обучение прекращалось, если в течение заданного количества эпох эта ошибка не уменьшалась. Оценка качества обученной сети осуществлялась после каждой эпохи с помощью статистических метрик, таких как средняя квадратичная ошибка и коэффициент детерминации на тренировочном, тестовом и валидационном наборах.

Было произведено 10 запусков модели НС с фиксированной архитектурой и параметрами алгоритма обучения и различными начальными весами – по 5 для двух способов разбиения данных на наборы. Статистические показатели сетей усреднялись по этим 5 запускам и по двум выходам сети для каждого из двух разбиений: рассчитывались среднее значение и стандартное отклонение для СКО и коэффициента детерминации.

4.3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА СУЩЕСТВЕННОСТИ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ

В данном вычислительном эксперименте были рассмотрены результаты применения четырех МАСВП: *метод анализа весов нейронной сети* (МАВНС), *метод перемешивания значений входных признаков* (МПЗВП), *метод фиксации значений входных признаков* (МФЗВП), *метод глубокого разложения Тейлора* (МГРТ).

Для оценки существенности входных признаков для каждой из 10 сетей было применено 4 метода для 2 типов разбиений: случайного и март-апрель. Получившиеся значения существенностей представляли собой:

- Для метода МАВНС – оценки (12) на основе весовых векторов нейросетевых моделей.
- Для метода МПЗВП и МФЗВП – значения СКО, вычисляемые при перемешивании (10) и фиксации (11) значений признаков.
- Для метода МГРТ – значения функции релевантности R (19).

Полученные значения были усреднены по 5 запускам для 2 разбиений.

Следующий этапом было применение метод отбора существенностей входных признаков с помощью *алгоритма заданного числа наилучших признаков*. Проводилась сортировка существенностей входных признаков в порядке возрастания значения существенности и отбор 50% признаков с наивысшими показателями существенности.

Для двух совокупностей значений существенности входных признаков по результатам применения каждого из 4 методов было обучено 10 моделей НС. В результате рассчитаны статистические метрики, усредненные по этим 5 запускам для двух разбиений исходного набора данных.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

Проанализируем статистические показатели результатов определения значений концентраций для газов водорода и пропана, с учётом применения всех исследуемых методов определения существенности входных признаков (Рис.13, 14, Табл.1, 2).

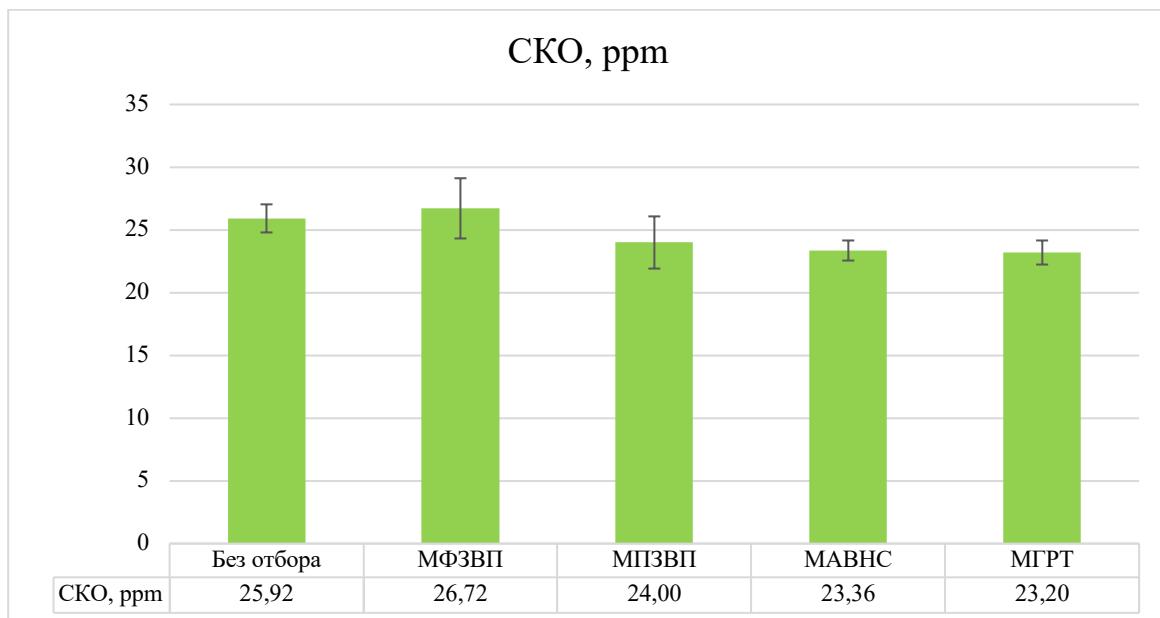


Рис.13. ОЦЕНКА МОДЕЛИ НС ЗНАЧЕНИЯ СКО ДЛЯ СЛУЧАЙНОГО РАЗБИЕНИЯ

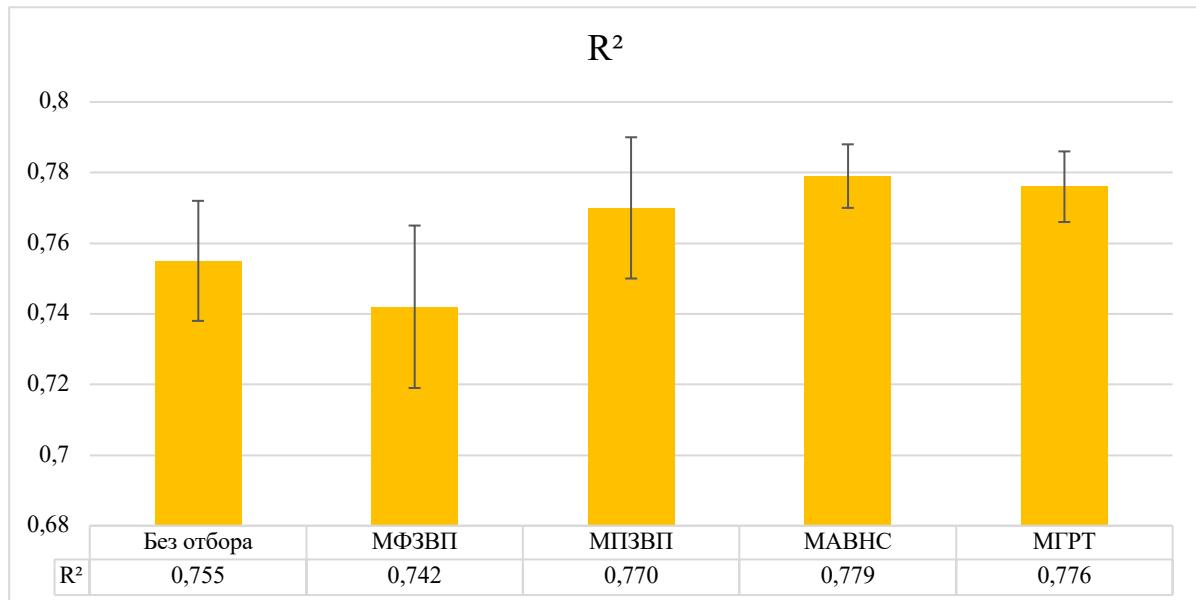


Рис.14. ОЦЕНКА МОДЕЛИ НС ЗНАЧЕНИЯ R^2 ДЛЯ СЛУЧАЙНОГО РАЗБИЕНИЯ

ТАБЛИЦА 1. ЗНАЧЕНИЯ СКО И R^2 И СТАНДАРТНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ ДЛЯ СЛУЧАЙНОГО РАЗБИЕНИЯ

Случайное	СКО, ppm	R^2
Без отбора	25.92 ± 1.12	0.755 ± 0.017
МФЗВП	26.72 ± 2.40	0.742 ± 0.023
МПЗВП	24.00 ± 2.08	0.770 ± 0.020
МАВНС	23.36 ± 0.80	0.779 ± 0.009
МГРТ	23.20 ± 0.96	0.776 ± 0.010

ТАБЛИЦА 2. ЗНАЧЕНИЯ СКО И R^2 И СТАНДАРТНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ ДЛЯ РАЗБИЕНИЯ МАРТ-АПРЕЛЬ

Март-апрель	СКО, ppm	R^2
Без отбора	103.52 ± 9.28	0.162 ± 0.101
МФЗВП	229.60 ± 5.44	-0.256 ± 0.007
МПЗВП	240.00 ± 12.64	-0.279 ± 0.011
МАВНС	230.72 ± 5.92	-0.271 ± 0.002
МГРТ	226.08 ± 3.52	-0.272 ± 0.003

Минимальные значения СКО при оценке качества работы НС получились при отборе признаков с помощью МАВНС и МГРТ, что подтверждает важность проведения отбора и оценки входных признаков для улучшения качества модели. Однако, с использованием МФЗВП НС показала результаты хуже, чем без отбора. Это может быть связано с тем, что такой метод не учитывает мультиколлинеарности признаков, что могло привести к удалению значимых признаков из модели.

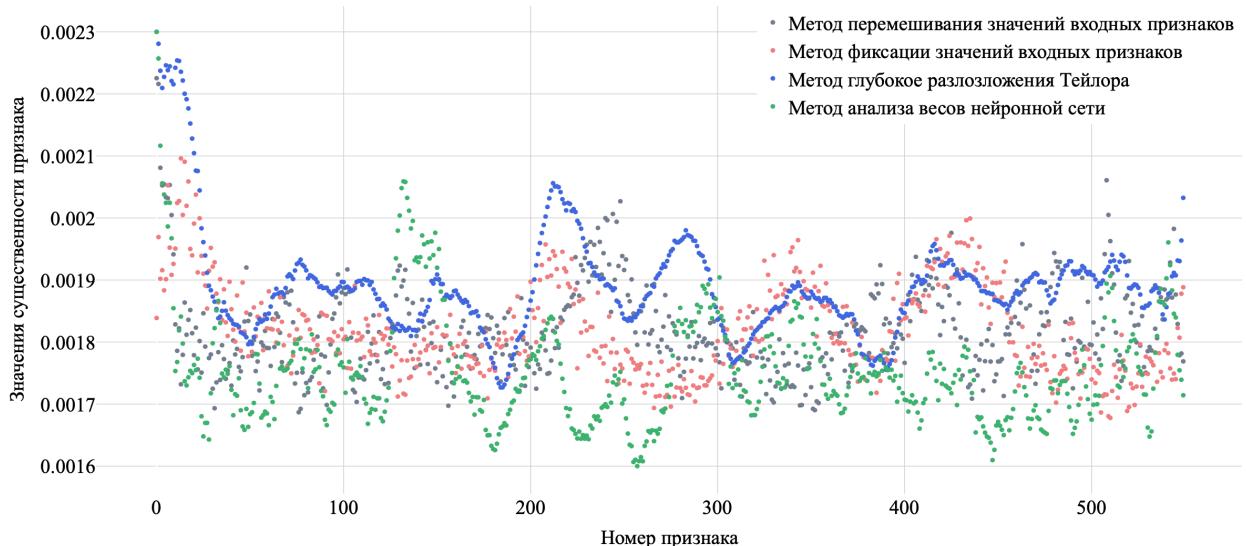


Рис.15. ЗНАЧЕНИЯ СУЩЕСТВЕННОСТЕЙ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ ДЛЯ ВСЕХ МЕТОДОВ

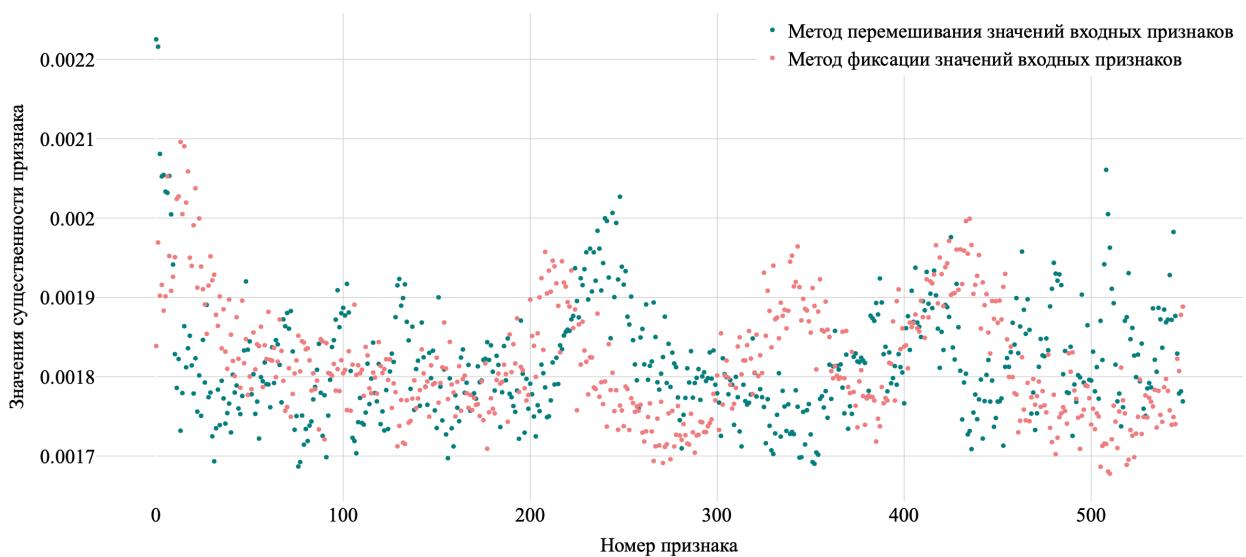


Рис.16. ЗНАЧЕНИЯ СУЩЕСТВЕННОСТЕЙ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ ДЛЯ МПЗВП И МФЗВП

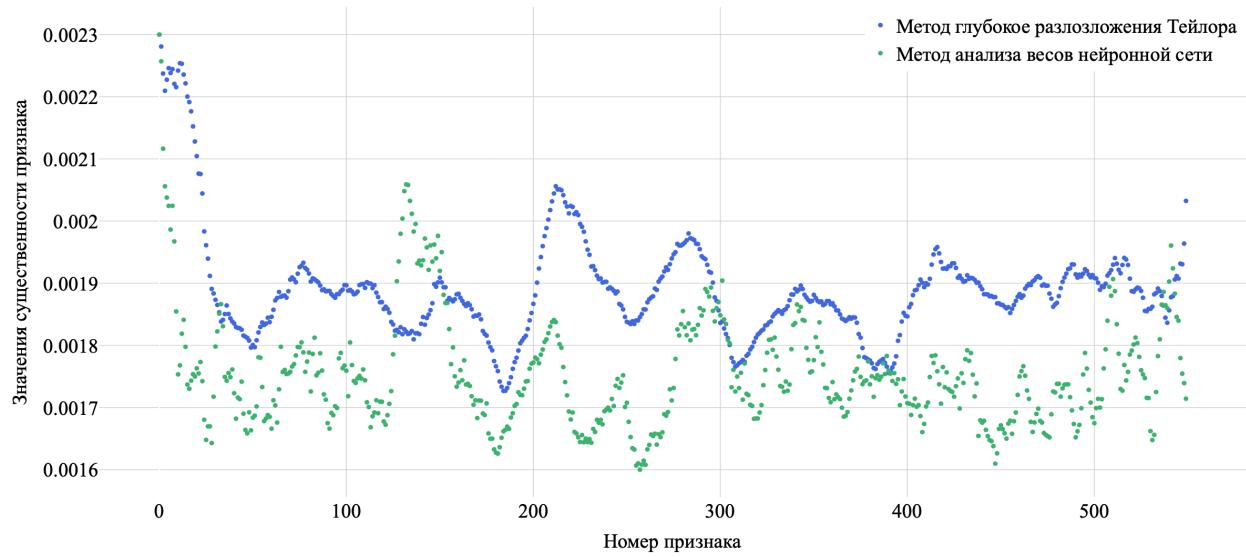


Рис.17. ЗНАЧЕНИЯ СУЩЕСТВЕННОСТЕЙ ВХОДНЫХ ПРИЗНАКОВ ДЛЯ МГРТ И МАВНС

Визуализация значений существенности (Рис. 15, 16, 17), полученных при использовании различных методов, может помочь более наглядно представить различия между методами. Значения существенностей МАВНС и МГРТ имеют большую контрастность, что может быть индикатором более точных результатов метода. Они могут быть эффективными при работе с данными, где существует сложная взаимозависимость между признаками в физических процессах. Кроме того, визуализация может помочь выявить взаимосвязи между признаками.

МФЗВП представляет малоконтрастную картину, значения мало отличаются друг от друга и выглядят случайными. Видимых корреляций между соседними точками нет. МФЗВП и МПЗВП являются менее информативными, но могут дать представление о минимальных уровнях значимости.

Таким образом, выбор метода отбора входных признаков в модели зависит от исходных данных и поставленных перед моделью задач. В случае с данными, где важно учитывать взаимодействие между признаками, следует использовать более сложные методы, такие как МГРТ и МАВНС. Если же данные относительно простые, то МПЗВП или МФЗВП могут быть более эффективными.

ВЫВОДЫ

По результатам работы могут быть сделаны следующие выводы.

1) Статистические параметры лучшего полученного нейросетевого решения задачи определения концентраций газов (водород, пропан) в воздухе мегаполиса Москвы на полном наборе признаков на тестовом наборе данных составили: среднеквадратичное отклонение СКО = 25.92 ± 1.12 ppm, коэффициент детерминации $R^2 = 0.755 \pm 0.017$.

2) Отбор 50% наиболее существенных входных признаков позволяет повысить качество нейросетевого решения.

3) Методы определения существенности входных признаков, основанные на анализе весов нейронной сети (собственно метод анализа весов и метод глубокого разложения Тейлора) позволяют при отборе 50% признаков добиться более высокого качества решения задачи по сравнению с референсными методами, основанными на фиксации и перестановке значений входных признаков.

4) Наилучшие полученные результаты на тестовом наборе данных составили: СКО = 23.20 ± 0.96 ppm при отборе 50% существенных признаков с помощью алгоритма глубокого разложения Тейлора, $R^2 = 0.779 \pm 0.009$ при использовании алгоритма анализа весов нейронной сети; отличие между двумя алгоритмами является статистически незначимым.

5) При использовании в качестве тестового набора данных, полученных в другом месяце, полученные результаты оказываются значительно хуже, а отбор существенных входных признаков не позволяет улучшить их. Это свидетельствует о существенных сезонных изменениях состава воздуха Москвы. Ещё одной причиной такого результата могут быть более низкие значения концентраций газов в тестовом наборе в этом эксперименте.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты проведенного исследования свидетельствуют о том, что отбор наиболее существенных входных признаков при нейросетевом решении задачи регрессии позволяет повысить качество решения рассматриваемой задачи. Методы, основанные на анализе весов нейронной сети, оказываются более эффективными, чем более простые методы оценки существенности входных признаков. В предметной области рассмотренной задачи описанный подход позволяет повысить точность определения состава газовых смесей и эффективность системы мониторинга.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. I. Shafer, R.R. Sambasivan, A. Rowe, G.R. Ganger, Specialized storage for big numeric time series, 5th USENIX Workshop on Hot Topics in Storage and File Systems, 2013.
2. Carrasquilla, J., & Melko, R. G. Machine learning phases of matter. *Nature Physics*, 13(5), P. 431-434, 2017.
3. J. Thorson, A. Collier-Oxandale, M. Hannigan, Using A Low-Cost Sensor Array and Machine Learning Techniques to Detect Complex Pollutant Mixtures and Identify Likely Sources, *Sensors-Basel*, 2019.
4. Y. Ege, M. Coramik, A new measurement system using magnetic flux leakage method in pipeline inspection, *Measurement*, 123, P. 163-74, 2018.
5. Z.H. Rui, G.Q. Han, H. Zhang, S. Wang, H. Pu, K.G. Ling, A new model to evaluate two leak points in a gas pipeline, *J Nat Gas Sci Eng*, 2017.
6. P. Moerland and E. Fiesler, Neural network adaptations to hardware implementations, *IDIAP*, 1997.
7. Ф. Розенблatt, Принципы нейродинамики: Перцептроны и теория механизмов мозга. М.: Мир, 480 с., 1965.
8. А.Н. Колмогоров. Представление непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиции непрерывных функций одного переменного и сложения, *Доклады АН СССР*, т. 114, №. 5, 953-956 с., 1957.
9. G. Cybenko. Approximation by superpositions of sigmoidal function, *Mathematics of Control, Signals, and Systems*, 1989, Vol. 2, P. 304-314.
10. K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White. Multilayer feedforward networks are universal approximators, *Neural Networks*, 1989, Vol. 2, No. 5, P. 359-266.
11. M. D. Zeiler, & R. Fergus,. Visualizing and understanding convolutional networks. *European Conference on Computer Vision (ECCV)*, P. 818-833, 2014.
12. H. Robinds, S. Monro, A stochastic approximation method, *Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 22. P. 400–407, 1951.
13. D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams, Learning representations by back-propagating errors, *Nature*, Vol. 323, No. 6088, P. 533-536, 1986.
14. R. Bellmann. Adaptive Control Processes: A guided tour., Princeton University Press, Series: Princeton Legacy Library, 1961.
15. I. Guyon, S. Gunn, M. Nikravesh, L. Zadeh, Feature Extraction: foundations and applications, *Studies in Fuzziness and Soft Computing*, Vol. 207. Chapter 4, P. 119-136, 2006.

- 16.R. Kohavi and G. John. Wrappers for feature subset selection, *Artificial Intelligence*, 97 (1–2): P. 273–324, 1997.
- 17.Cohen, Y. Huang, J. Chen, J. Benesty. Pearson Correlation Coefficient, Noise Reduction in Speech Processing. ISBN 978-3-642-00295-3, Springer Berlin Heidelberg, P. 1-4, 2009.
- 18.W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1992.
- 19.Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. Издательский дом «Вильямс», 912 с., 2007.
- 20.Стрижов В. В. Методы индуктивного порождения регрессионных моделей. М.: ВЦ РАН. 55 с., 2008.
- 21.D.F. Specht. A Generalized Regression Neural Network, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2, Nov., P. 568-576, 1991.
- 22.M. Gevrey, I. Dimopoulos, S. Lek. Review and comparison of methods to study the contribution of variables in artificial neural network models, *Ecological Modelling*, P. 249-264, 2003.
- 23.Linda, L. Feature Selection Using Neural Networks with Contribution Measures, Computer Science and Engineering, University of New South Wales, 1995.
- 24.Warren S. Sarle. How to measure importance of inputs?, SAS Institute Inc., Cary, NC, USA. <ftp://ftp.sas.com/pub/neural/importance.html>
- 25.А.Г. Гужва, Разработка методологии и программного комплекса для определения существенности входных признаков при нейросетевом анализе данных, дис. канд. к.ф.-м. наук, Московский Государственный Университет, Москва, 2011.
- 26.Montavon, G., Lapuschkin, S., Binder, A., Samek, W., & Müller, K. -R. Explaining nonlinear classification decisions with deep Taylor decomposition. *Pattern Recognition*, 65, P. 211-222, 2017.
- 27.Wolpert, D., Stacked Generalization. // *Neural Networks*, 5(2), pp. 241-259., 1992.
- 28.Y. G. Maguire et al., Physical principles for scalable neural recording, *Front. Comput. Neurosci.*, Vol 7, P. 137, 2013.
- 29.P. Pudil, J. Novovičová, J. Kittler. Floating search methods in feature selection. // *Pattern Recognition Letters*, 15(11): P. 1119–1125, 1994.
- 30.Головко В. А. под ред. проф. А. И. Галушкина. Нейронные сети: обучение, организация и применение, Москва: ИПРЖР, 2001.
- 31.Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание, Издательский дом «Вильямс», Москва, 2006.

- 32.Р. Каллан, «Основные концепции нейронных сетей», Издательский дом «Вильямс», 2001.
- 33.Н.Г. Загоруйко. Прикладные методы анализа данных и знаний, Новосибирск: Издательство института математики, 1999.
- 34.L. Oukhellou, P. Aknin, H. Stoppiglia, G. Dreyfus. A new decision criterion for feature selection: Application to the classification of non-destructive testing signatures, European Signal Processing Conference (EUSIPCO'98), Rhodes, 1998.