

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИЧНИХ МАШИН І СИСТЕМ**

ЧЕРНОДУБ АРТЕМ МИКОЛАЙОВИЧ

УДК 681.5

**НАВЧАННЯ ДИНАМІЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ НА ЗАДАЧАХ
ДОВГОСТРОКОВОГО ПРОГНОЗУВАННЯ**

05.13.23 – системи та засоби штучного інтелекту

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Київ – 2016

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті проблем математичних машин і систем Національної академії наук України

Науковий керівник доктор технічних наук,
старший науковий співробітник
Різник Олександр Михайлович,
Інститут проблем математичних машин і систем
НАН України,
завідувач відділу нейротехнологій

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Зайченко Юрій Петрович,
Навчально-науковий комплекс «Інститут прикладного
системного аналізу» Національного технічного
університету України «Київський політехнічний
інститут ім. Ігоря Сікорського»,
професор кафедри математичних методів системного
аналізу

доктор технічних наук,
старший науковий співробітник
Рачковський Дмитро Андрійович,
Міжнародний науково-навчальний центр
інформаційних технологій та систем НАН і МОН
України,
провідний науковий співробітник відділу
нейромережових технологій обробки інформації

Захист відбудеться “2” листопада 2016 р. о 14 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.204.01 в Інституті проблем математичних машин і систем НАН України за адресою: 03187, м. Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 42.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту проблем математичних машин і систем НАН України за адресою: 03187, м. Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 42.

Автореферат розісланий “28” вересня 2016 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради

М.Г. Ієвлєв

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. У теперішній час зростає актуальність ефективного вирішення практичних задач, пов'язаних з обробкою послідовностей. Це, наприклад, задачі прогнозування часових рядів для вирішення фізичних та економічних задач, розпізнавання мовних команд та обробки аудіо-сигналів, обробка текстів, ідентифікація та управління динамічними об'єктами. Для кожної з цих предметних областей та задач існують свої арсенали спеціалізованих методів для вирішення задач – наприклад, методи ARMA, ARIMA, Вох-Jenkins для прогнозування часових рядів, приховані марковські моделі для розпізнавання мовних команд або ПД-контролери для управління динамічними об'єктами.

Тим не менш, у багатьох випадках динамічні нейронні мережі, різновид штучних нейронних мереж, що використовуються для вирішення задач, пов'язаних з обробкою послідовностей, завдяки своїй нелінійності, універсальності до природи даних та обчислювальної ефективності (за рахунок здатності до паралелізації та ефективного способу обчислення похідних похибки навчання) випереджають за точністю роботи і зручністю використання інші методи. Проблемою навчання нейромереж на невідомих даних є виявлення довгострокових причинно-наслідкових залежностей у даних. Довгострокові залежності в модельованих процесах, які мають невідому внутрішню структуру з нелінійними внутрішніми і зовнішніми зворотними зв'язками, потребують формування всередині нейромереж довгострокової пам'яті невідомої апріорі глибини.

У фокусі даної роботи є нейромережі на основі багатошарового перцептрона, що є простими і, одночасно, потужними архітектурами, для яких створено великий арсенал алгоритмів навчання і які використовуються для широкого спектру наукових та інженерних задач. Базовими способами надання нейромережам на основі багатошарового перцептрона властивостей для роботи з динамічними даними є додавання зовнішніх ліній, що містять затримані у часі сигнали (А. Waibel, Т. Hanazawa, G. Hinton, Є.В. Бодянський, В.С. Степашко) та додавання рекурентних зв'язків у внутрішню структуру нейромережі (R.J. Williams, D. Zipser, J.L. Elman).

Для динамічних нейромереж з лініями затримки невизначеність порядку модельованого процесу спричиняє необхідність перебору параметрів ліній затримок або створення багатомодульних нейромереж зі спеціалізацією різних модулів для різних залежностей у часі або типів навколишнього середовища. У разі використання стандартних методів навчання такі нейромережі мають певні недоліки точності прогнозування навчених нейромережевих моделей на задачах ітеративного багатокрокового прогнозування.

Для рекурентних нейромереж на основі багатошарового перцептрона головною проблемою навчання довгостроковим залежностям є ефект зникнення градієнтів, що полягає в експоненційному від кількості пройдених шарів зменшенню градієнтів похибки навчання під час зворотного поширення похибки через шари нейронів у розгорнутій назад у часі нейромережі. Це робить рекурентну нейромережу під час навчання нечутливою до виявлення в навчальній вибірці залежностей між подіями, що знаходяться далеко між собою у часі.

Типовим способом вирішення цієї задачі є розробка нових архітектур динамічних нейромереж на кшталт Echo State Networks, Long-Short Term Memory, Gated Recurrent Units. Такі архітектури є ускладненими та непрозорими для аналізу, містять надвелику кількість вільних параметрів. Разом з тим, прості рекурентні нейромережі на основі багатошарового перцептрона є універсальними апроксиматорами для моделювання динамічних систем, вони прості і технологічні, що робить їх привабливими для практичного використання.

Вивчення проблеми навчання нейромереж довгостроковим залежностям у даних пов'язано з іменами багатьох дослідників: Y. Bengio, G. Hinton, S. Hochreiter, T. Mikolov, J. Schmidhuber та ін. Одержані ними за останні десятиріччя наукові результати призвели до появи нових напрямків розвитку теорії динамічних нейромереж, створення нових моделей динамічних нейромереж, формування потужного інструментарію у вигляді різноманітних бенчмарків для прискорення виконання експериментальних досліджень у галузі динамічних нейромереж. Ці результати відображають стійке зростання світової наукової активності в цій галузі. Тому актуальною є наукова задача щодо удосконалення методів навчання нейронних мереж прогнозуванню часових послідовностей, що містять довгострокові залежності, та управління динамічними об'єктами.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційне дослідження проводилось згідно з планами науково-дослідних робіт відділу Нейротехнологій Інституту проблем математичних машин і систем НАН України, в тому числі держбюджетними темами «Дослідження динамічної асоціативної пам'яті на основі відкритих рекурентних нейромереж», шифр «Пам'ять», виконано за Постановою Бюро Відділення інформатики НАН України від 28.05.2009 р., № держ.реєстр. 0110U000015, «Дослідження моделей розвитку і розробка аналітичних методів та інструментальних засобів виявлення та оцінки впливу зумовлюючих чинників на економічні та соціальні тренди», № держ.реєстр. 0113U001449, 2013-2015 рр., міжнародним грантом УНТЦ Р-357 «Research of Recurrent Dynamic Neural Networks for Adaptive Control of Complex Dynamic Systems», партнер European Office of Aerospace Research & Development (EOARD), 2009-2010 рр., науково-технічним проектом «Дослідження та розробка удосконаленого алгоритма 3D-навігації за даними поточних зображень місцевості», № держ.реєстр. 0114U000672, 2014 р., партнер державне конструкторське бюро «Південне» імені М. К. Янгеля.

Мета і задачі дослідження. Метою дослідження в дисертаційній роботі є підвищення якості роботи динамічних нейромереж для розв'язання задач прогнозування і управління складними динамічними об'єктами, що містять у собі нелінійності і довгострокові залежності.

Для досягнення мети дослідження в роботі було поставлено і розв'язано такі задачі:

1. Виконати огляд існуючих архітектур динамічних нейромереж, методів нейроуправління та способів навчання динамічних нейромереж. Проаналізувати відомі способи вирішення проблеми ефекта зникнення градієнтів, формування та зберігання коротко- і довгострокових залежностей в динамічних нейромережах і запропонувати рекомендації для їх застосування в залежності від характеру задачі.

2. Дослідити процес зворотного поширення похибки у часі для простих рекурентних нейромереж.

3. Розробити та експериментально дослідити методи навчання простих рекурентних нейронних мереж, що дозволяють подолати проблему ефекта зникнення градієнтів.

4. Розробити та експериментально дослідити методи навчання нейроконтролерів у методі нейроуправління з еталонною моделлю, що забезпечують кращу точність управління нелінійним динамічним об'єктом.

5. Розробити методи навчання динамічних нейромереж прямого поширення з лінією затримок для задач багатокрокового прогнозування та експериментально їх дослідити.

Об'єкт дослідження – динамічні нейронні мережі на основі архітектури багат шарового перцептрона, процеси і об'єкти, що оперують під дією чинників зовнішнього середовища.

Предмет дослідження – моделі та методи навчання динамічних нейронних мереж для задач прогнозування та управління.

Методи дослідження. При розробці та дослідженні методів удосконалення навчання динамічних нейромереж використовувалися методи лінійної алгебри, математичного моделювання, класичної та сучасної теорії управління, програмування, математичної статистики та інші.

Наукова новизна одержаних результатів

1. Вперше запропоновано метод псевдорегуляризації градієнтів для простих рекурентних нейромереж на основі багат шарового перцептрону, який відрізняється включенням в цільовий функціонал оптимізації члену, що обмежує значення градієнтів похибки, які обчислюються методом зворотного поширення в часі та забезпечує подолання проблеми зникнення градієнтів і, як наслідок, кращу якість навчання рекурентних нейромереж на даних, що містять довгострокові причинно-наслідкові залежності.

2. Вперше аналітично досліджено вплив прикладів з навчальної вибірки на евклідову норму векторів локальних градієнтів процедури зворотного поширення похибки для простих рекурентних нейромереж та виведено достатні умови на збільшення і зменшення норми, що дозволяє модифікувати метод псевдорегуляризації градієнтів для зменшення ефекту зникнення градієнтів при навчанні простих рекурентних нейромереж.

3. На основі виведених достатніх умов (п.2) удосконалено розроблений метод псевдорегуляризації градієнтів (п.1) за рахунок відбору придатних для навчання на поточній ітерації прикладів вибірки, що забезпечує збіжність навчання.

4. Удосконалено метод нейроуправління з нейромодулятором (нейромережевою моделлю об'єкта управління) для розрахунку похідних похибки навчання шляхом застосування розробленого методу псевдорегуляризації для навчання нейромодулятора, що забезпечує кращу точність управління об'єктом.

5. Удосконалено метод навчання динамічних нейромереж прямого поширення з лінією затримок на основі розширеного фільтра Калмана за рахунок введення в функціонал навчання в явному вигляді похибки ітеративної багатокрокової прогнозувальної траєкторії, що забезпечує кращу точність багатокрокового прогнозування.

Практичне значення одержаних результатів. На основі розроблених методів створено такі програмні засоби для задач прогнозування часових рядів і управління динамічними об'єктами:

- Extended Kalman Filtering Neural Networks Toolbox – інструментальний засіб для створення та навчання динамічних нейромереж у середовищах MATLAB і Simulink;
- DynamicNetworksLib – бібліотека класів, що реалізує основні архітектури динамічних нейронних мереж на основі багатoshарового перцептрона;
- GDTrainer, SGDTrainer, EKFTTrainer – програмні модулі, що реалізують градієнтні методи оптимізації для навчання динамічних нейромереж, а саме: градієнтний спуск, стохастичний градієнтний спуск, метод розширеного фільтра Калмана;
- 4GenSim – програмний модуль, що дозволяє виконувати конверсію навчених в MATLAB нейромереж в моделі Simulink;
- програмний макет NeuroControl для навчання нейроконтролерів в режимі реального часу;
- модулі предобробки даних: форматування, нормування, клінінг даних тощо.

Теоретичні та практичні результати досліджень використовуються для прогнозування економічних показників в компанії «Укрзолото» (акт впровадження від 15.04.2016) та в навчальному процесі Фізико-технічного навчально-наукового центра НАН України на кафедрі «Теоретична кібернетика і методи оптимального управління» при ІК НАН України, зокрема, в навчальному курсі для магістрів «Штучний інтелект та нейронні мережі» (акт впровадження від 21.06.2016).

Особистий внесок здобувача. Основний зміст роботи, теоретичні висновки та рекомендації, виконані та розроблені автором особисто на основі досліджень, проведених у відділі нейротехнологій Інституту проблем математичних машин і систем НАНУ. В друкованих працях, опублікованих у співавторстві, автору належать: [5] – підготовка та опис всіх схем нейроуправління за винятком багатомодульного управління, [7] – збір та підготовка даних, написання огляду для статті, [13] – розробка та проведення експериментальної частини.

Апробація результатів дисертації. Основні положення та наукові результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на таких міжнародних та українських науково-технічних конференціях: міжнародній конференції “IEEE 23rd International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN-2013)” (м. Софія, Болгарія, 2013 р.); міжнародній конференції “Інтелектуальні системи прийняття рішень та проблеми обчислювального інтелекту (ISDMCI-2013)” (м. Євпаторія, 2013 р.); міжнародній конференції “IEEE IV International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems (ICUMT-2012)” (м. Санкт-Петербург, Російська Федерація, 2012 р.); міжнародній конференції “XVIII-th International Conference «Knowledge - Dialogue - Solution» (KDS-2012)” (м. Київ, 2012 р.); XIV всеросійській науково-технічній конференції «Нейроінформатика-2012» (м. Москва, Російська Федерація, 2012 р.); XIII всеросійській науково-технічній конференції «Нейроінформатика-2011» (м. Москва, Російська Федерація, 2011 р.).

Публікації. Результати дисертаційного дослідження опубліковані в 14 друкованих роботах [1–14], серед яких 7 статей у наукових фахових виданнях, з яких 5 статей у фахових журналах, рекомендованих ДАК України [2–4, 6–7] і 2 статті в фахових журналах іноземних держав, що входять до міжнародних науково-метричних баз (SCOPUS, ACM Digital Library та ін.) [1, 5], 6 доповідей на наукових конференціях [8–13], 1 розділ в книзі [14]. З них 11 друкованих робіт [1–5, 8–12, 14] є одноосібними.

Структура й обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і додатку. Загальний обсяг дисертації становить 156 сторінок, у тому числі 137 сторінок основного тексту, 38 рисунків, з них 2 – на окремій сторінці, 12 таблиць, список використаних джерел з 123 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету і задачі дослідження, наукову новизну одержаних результатів, представлено публікації автора.

У **першому розділі** розглянуто задачі нейроідентифікації нелінійних динамічних систем і нейроуправління нелінійними динамічними об'єктами.

Динамічні перцептронно-подібні нейромережі є модифікаціями статичного багат шарового перцептрона для розпізнавання образів. Розглянуто основні архітектури динамічних нейронних мереж на основі багат шарового перцептрона: динамічний багат шаровий перцептрон (Dynamic Multilayer Perceptron, нейромережа DMLP), проста рекурентна нейромережа (Simple Recurrent Network, нейромережа SRN), нейромережа нелінійної авторегресії із зовнішніми входами (Nonlinear AutoRegression with eXternal inputs, нейромережа NARX) (рис. 1).

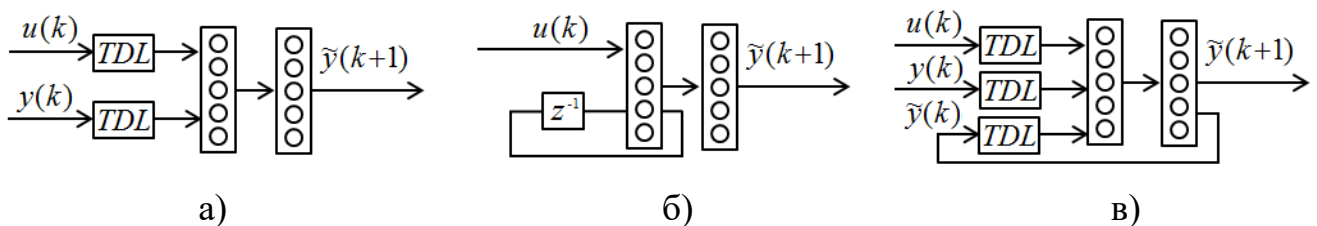


Рисунок 1 – Архітектури динамічних нейромереж: а) нейромережа DMLP; б) нейромережа SRN; в) нейромережа NARX

Базові способи надання статичним нейромережам здатності оперувати з динамічними даними це: додавання зовнішніх «ліній затримок» (Time Delay Line, TDL) для врахування ретроспективних даних і додавання рекурентних зв'язків у внутрішню структуру нейромережі. Перший спосіб, додавання ліній затримок, є простим і технологічним способом, фактично тут має місце використання статичних багат шарових перцептронів прямого поширення з зовнішнім банком пам'яті. Для таких нейромереж градієнти похибки обчислюються звичайним методом зворотного поширення похибки, для них простіше проводити аналіз стабільності поведінки навчених нейромереж. З іншого боку, характерна довжина у часі залежностей між

даними в навчальній вибірці фактично встановлюється апріорі шляхом задавання параметрів ліній затримок.

Рекурентні нейромережі є універсальними апроксиматорами динамічних систем. Вони мають більш гнучку внутрішню архітектуру. Потенційно такі нейромережі є більш потужними і можуть зберігати інформацію в рекурентних зв'язках скільки завгодно довго. Але в розглянутих наукових роботах, присвячених рекурентним нейромережам, головною проблемою їх навчання називають зникнення градієнтів, коли градієнти похибки експоненціально зменшуються до нуля при пропусканні похибки через розгорнуту назад у часі методом зворотного поширення в часі (Backpropagation Through Time, ВРТТ) нейромережу, що ускладнює або робить неможливим навчання довгостроковим залежностям.

У другому розділі розроблено метод навчання нейромереж на основі методу розширеного фільтра Калмана для динамічних нейромереж прямого поширення з лінією затримок для кращого виявлення довгострокових залежностей у задачах багатокрокового прогнозування.

Розглянуто модифікації методу розширеного фільтра Калмана для навчання нейромереж, а саме мініпакетний метод розширеного фільтра Калмана, метод розширеного фільтра Калмана з імплементованою похибкою крос-ентропії. З метою порівняння в розділі розглядаються градієнтні методи оптимізації 1-го порядку, а саме: градієнтний спуск, градієнтний спуск з використанням моменту, стохастичний градієнтний спуск.

Для навчання нейромережі методом розширеного фільтра Калмана ітеративно виконуються такі кроки.

1) Прямий прохід: обчислюються виходи нейромережі $\mathbf{y}(k+1)$ розмірності O .

2) Зворотний прохід: методом зворотного поширення похибки обчислюються похідні $\frac{\partial \mathbf{y}(k+1)}{\partial \mathbf{w}}$, де \mathbf{w} – вагові коефіцієнти нейромережі, N_w – кількість вагових коефіцієнтів нейромережі. Заповнюється матриця спостережень $\mathbf{H}(k)$:

$$\mathbf{H}(k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{y}_1(k+1)}{\partial w_1} & \frac{\partial \tilde{y}_1(k+1)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial \tilde{y}_1(k+1)}{\partial w_{N_w}} \\ \frac{\partial \tilde{y}_o(k+1)}{\partial w_1} & \frac{\partial \tilde{y}_o(k+1)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial \tilde{y}_o(k+1)}{\partial w_{N_w}} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

3) Обчислюється матриця нев'язок $\mathbf{E}(k)$:

$$\mathbf{E}(k) = [y_1(k+1) - \tilde{y}_1(k+1) \quad \dots \quad y_o(k+1) - \tilde{y}_o(k+1)]. \quad (2)$$

4) Обчислюються нові значення матриць кореляції $\mathbf{P}(k+1)$ і вагових коефіцієнтів нейромережі $\mathbf{w}(k+1)$:

$$\mathbf{K}(k) = \mathbf{P}(k)\mathbf{H}(k)^T [\mathbf{H}(k)\mathbf{P}(k)\mathbf{H}(k)^T + \mathbf{R}]^{-1}, \quad (3)$$

$$\mathbf{P}(k+1) = \mathbf{P}(k) - \mathbf{K}(k)\mathbf{H}(k)\mathbf{P}(k) + \mathbf{Q}, \quad (4)$$

$$\mathbf{w}(k+1) = \mathbf{w}(k) + \mathbf{K}(k)\mathbf{E}(k). \quad (5)$$

Якщо динамічна нейромережа була навчена і емпірична модель процесу $\tilde{F}(\cdot)$ побудована, можна здійснити однокрокове (Single-Step-ahead, SS) прогнозування $\mathfrak{y}(\cdot)$ з використанням результатів L реальних останніх вимірювань:

$$\mathfrak{y}(k+1) = F(\mathbf{y}(k), \dots, \mathbf{y}(k-L+1)). \quad (6)$$

Ітеративне багатокрокове (Multi-Step-ahead, MS) прогнозування представляє собою генерування в режимі авторегресії на кожному такті траєкторії $\{\mathfrak{y}(k+1), \dots, \mathfrak{y}(k+H)\}$ на H кроків вперед замість однієї оцінки $\mathfrak{y}(k+1)$, як в однокроковому прогнозуванні:

$$\mathfrak{y}(k+2) = \tilde{F}(\mathfrak{y}(k+1), \mathbf{y}(k), \dots, \mathbf{y}(k-L)), \quad (7)$$

$$\mathfrak{y}(k+3) = \tilde{F}(\mathfrak{y}(k+2), \mathfrak{y}(k+1), \dots, \mathbf{y}(k-L+1)), \quad (8)$$

...

$$\mathfrak{y}(k+H) = \tilde{F}(\mathfrak{y}(k+L-1), \mathfrak{y}(k+L-2), \dots, \mathfrak{y}(k+H-L)). \quad (9)$$

Чим більше горизонт майбутнього багатокрокового прогнозування H , тим більш довгострокові залежності мають зберігатися в пам'яті динамічної нейромережі внаслідок навчання.

У другому розділі удосконалено метод навчання розширеного фільтра Калмана для підвищення якості багатокрокових прогнозів для нейромереж прямого поширення DMLP, що називається «прогнозуюче поширення в часі» (Forecasted Propagation Through Time, FPTT). Підвищення якості відбувається за рахунок оптимізації прогнозованої похибки на H кроків вперед:

$$E_{HMSE} = \frac{1}{N_D} \sum_{k=1}^{N_D-H} \sum_{h=1}^H (y(k+h) - \tilde{y}(k+h))^2, \quad (10)$$

де N_D – кількість прикладів у вибірці;

$y(k)$ – цільові значення з навчальної вибірки;

$\tilde{y}(k)$ – виходи нейромережі.

На кожному кроці нейромережа розгортається вперед у часі на H кроків вперед з використанням (7)-(9) таким самим чином, як для виконання звичайного багатокрокового прогнозування, обчислюються виходи $\{\mathfrak{y}(k+1), \dots, \mathfrak{y}(k+H)\}$ (рис. 2).

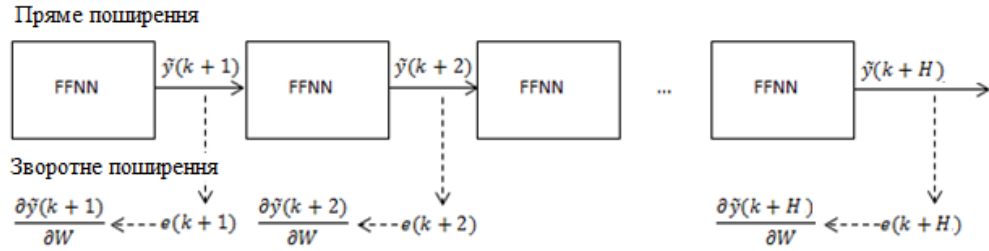


Рисунок 2 – Обчислення методу «прогнозуючого поширення в часі» нев’язок і динамічних похідних для нейромереж прямого поширення («FFNN»)

Далі для кожного з прогнозів обчислюються нев’язки прогнозування $\mathbf{e}(k+h) = \mathbf{y}(k+h) - \hat{\mathbf{y}}(k+h)$, $h = 1, \dots, H$. Набір похідних $\left\{ \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(k+h)}{\partial \mathbf{w}} \right\}$ обчислюється незалежно одна від одної для кожної копії розгорнутої у часі вперед нейромережі з використанням методу зворотного поширення похибки. Нейромережа з O виходами, що виконує ітеративний багатокроковий прогноз на H кроків вперед, розглядається як віртуальна нейромережа, що має OH виходів.

Матриці спостережень $\mathbf{H}_{FPTT}(k)$ і нев’язок $\mathbf{E}_{FPTT}(k)$ тепер мають вигляд ($O = 1$):

$$\mathbf{H}_{FPTT}(k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(k+1)}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(k+1)}{\partial w_{N_w}} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(k+H)}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(k+H)}{\partial w_{N_w}} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

$$\mathbf{E}_{FPTT}(k) = [y(k+1) - \hat{y}(k+1) \quad \dots \quad y(k+H) - \hat{y}(k+H)]. \quad (12)$$

Решта обчислень така сама, як і в випадку мініпакетного навчання методом розширеного фільтра Калмана (1)-(5). При $h=1$ таке багатокрокове навчання (11)-(12) вироджується до звичайного однокрокового навчання методом розширеного фільтра Калмана.

Для експериментального порівняння різних алгоритмів навчання і різних архітектур динамічних нейромереж для задач прогнозування використовувались часові ряди, які є відомими бенчмарками: “SUNSPOTS”, “MG17”, “MG30”, “LASER”. Часовий ряд “SUNSPOTS”, також відомий як «числа Вольфа», являє собою історичні спостереження кількості плям на Сонці за рік в період з 1700 по 2008 роки. Часові ряди “MG17”, “MG30”, “LASER” є часовими рядами, що містять хаотичну динаміку, вони є одновимірними і містять приблизно 1000 значень кожний, поділені на навчальну, валідаційну і тестувальну підвибірки.

Внаслідок урахування власних похибок роботи нейромережі на попередніх кроках і збільшення довгостроковості пам’яті в нейромережах прямого поширення збільшення якості багатокрокового прогнозування становило від 10% до 80% (табл. 1-2).

Таблиця 1 – Середньоквадратична похибка навчання алгоритмом розширеного фільтра Калмана задачі багатокрокового прогнозування для різних типів нейромереж, горизонт $H = 14$

	SUNSPOTS, $\cdot 10^{-1}$		MG17, $\cdot 10^{-2}$		MG30, $\cdot 10^{-2}$		LASER, $\cdot 10^{-2}$	
	best	mean	best	mean	best	mean	best	mean
DMLP	2,03	3,13	13,89	15,79	8,00	8,04	23,77	24,46
DMLP + FPTT	1,19	1,79	3,17	8,11	5,91	6,21	18,84	20,99
SRN	0,84	1,18	0,01	0,03	0,01	0,03	0,58	3,57
NARX	1,89	2,62	3,31	8,78	4,04	6,61	20,84	33,82

Таблиця 2 – Середньоквадратична похибка навчання методом EKF задачі багатокрокового прогнозування для різних типів нейромереж на наборах даних курсів банківських металів, горизонт $H = 16$

	GOLD, $\cdot 10^{-2}$		SILVER, $\cdot 10^{-2}$		PLATINUM, $\cdot 10^{-2}$		PALLADIUM, $\cdot 10^{-2}$	
	best	mean	best	mean	best	mean	best	mean
DMLP	0,91	1,23	2,04	2,35	0,82	0,97	2,30	2,89
DMLP+FPTT	0,41	0,59	1,18	1,33	0,74	0,81	1,04	1,45

У третьому розділі розроблено метод навчання рекурентних нейромереж для кращого виявлення довгострокових залежностей на основі регуляризації градієнта («псевдорегуляризації»).

На кожному кроці часу k проста рекурентна нейромережа одержує вектор зовнішнього входу $\mathbf{u}(k)$, вектор попереднього стану $\mathbf{z}(k-1)$ і виробляє вихідний вектор $\mathbf{y}(k+1)$:

$$\mathbf{a}(k) = \mathbf{u}(k)\mathbf{w}_{in} + \mathbf{z}(k-1)\mathbf{w}_{rec} + \mathbf{b}, \quad (13)$$

$$\mathbf{z}(k) = f(\mathbf{a}(k)), \quad (14)$$

$$\mathbf{y}(k+1) = g(\mathbf{z}(k)\mathbf{w}_{out}), \quad (15)$$

де \mathbf{w}_{in} – матриця вхідних вагових коефіцієнтів;

\mathbf{w}_{rec} – матриця вагових коефіцієнтів рекурентних зв'язків;

\mathbf{w}_{out} – матриця вагових коефіцієнтів вихідних зв'язків;

$\mathbf{a}(k)$ – вектор пресинаптичних активацій;

$\mathbf{z}(k)$ – вектор постсинаптичних активацій (або станів нейромережі);

$f(\cdot)$ і $g(\cdot)$ – нелінійні активаційні функції для прихованого та вихідного шарів нейронів відповідно.

Динамічна похідна похибки $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}} = \sum_{n=1}^h \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}(k-n)}$, де h – це глибина зворотного розгортання ВРТТ. Проміжна змінна $\boldsymbol{\delta} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{a}}$, що має назву «вектор локальних градієнтів», зазвичай вводиться для зручності:

$$\boldsymbol{\delta}(k-h) = \boldsymbol{\delta}(k-h+1) \mathbf{w}_{rec}^T \text{diag}(f'(\mathbf{a}(k-h))). \quad (16)$$

З використанням матриці Якобі $\mathbf{J}(n) = \frac{\partial \mathbf{z}(n)}{\partial \mathbf{z}(n-1)}$ (16) запишеться як

$$\boldsymbol{\delta}(k-h) = \boldsymbol{\delta}(k-h+1) \mathbf{J}(k-h). \quad (17)$$

Тепер можна показати ефект вибуху/зникнення градієнтів: як впливає з (17), норма зворотно-поширених локальних градієнтів строго залежить від норми матриць Якобі $\mathbf{J}(\cdot)$, тому що вектори локальні градієнти $\boldsymbol{\delta}(k-h)$ містять добутки матриць Якобі:

$$\boldsymbol{\delta}(k-2) = \boldsymbol{\delta}(k) \mathbf{J}(k) \mathbf{J}(k-1), \quad (18)$$

$$\boldsymbol{\delta}(k-h) = \boldsymbol{\delta}(k) \mathbf{J}(k) \overset{\dots}{\mathbf{J}(k-1)} \dots \mathbf{J}(k-h+1). \quad (19)$$

Чим “старіші” вектори локальних градієнтів, тим більше матриць Якобі було помножено для їх обчислення. Якщо норми матриць Якобі більше 1, локальні градієнти будуть експоненційно зростати, відбувається ефект “вибуху градієнтів”. Це відповідає поведінці рекурентних неймереж, коли довгострокові компоненти є більш важливими, ніж короткострокові. І навпаки, якщо норма матриць Якобі менше 1, це призводить до ефекту зникнення градієнтів і “забування” довгострокових випадків.

У розділі проаналізовано архітектурні способи боротьби з ефектом зникнення градієнта у різних типів рекурентних неймереж, а саме в неймережах NARX, Echo State Networks, LSTM, GRU. Зазначено, що один із найбільш загальних методів для уникнення ефекту зникнення градієнтів запропонований автором у роботах [2–3, 10–11] і названо “псевдорегуляризація”. Дуже подібний метод одночасно незалежно було запропоновано дослідниками Р. Паскану, Т. Міколов і Д. Бенджио і названо методом “регуляризації градієнта” (“gradient regularization”).

Ідея розробленого методу псевдорегуляризації градієнтів полягає в керуванні нормою векторів зворотного поширення похибки під час навчання. В цьому випадку неймережа вчиться не лише підлаштовуватись під дані навчальної вибірки, але й тримати норму векторів зворотно-поширених градієнтів у певних межах. Це здійснюється шляхом модифікації цільової функції навчання $L(\mathbf{w})$ для виконання багатокритеріальної оптимізації шляхом додавання додаткового члена $\Omega(\mathbf{w})$, який відповідає за величину зворотно-поширених градієнтів:

$$L(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda\Omega(\mathbf{w}), \quad (20)$$

де $E(\mathbf{w})$ – цільова функція навчання, що мінімізує похибку навчання (наприклад, регресії або класифікації);

$\Omega(\mathbf{w})$ – регуляризатор, що запобігає надмірному зменшенню або збільшенню градієнтів;

λ – коефіцієнт, що регулює вклад псевдорегуляризації.

У роботах автора [6], [13] було запропоновано такий регуляризатор:

$$\Omega(\mathbf{w}) = \sum_k \left(\left\langle 1 - \|\delta(\mathbf{w}, k)\|_2 \right\rangle \right)^2. \quad (21)$$

Його метою є підтримка середньої норми векторів локальних градієнтів близько до 1. Для цього аналітично були виведені похідні $\frac{\partial\Omega(\mathbf{w})}{\partial\mathbf{w}}$ для використання у градієнтному

оптимізаційному алгоритмі: $\frac{\partial\Omega_k(\mathbf{w})}{\partial\mathbf{w}} = 2\Omega_k(\mathbf{w}) \frac{\partial\delta(k)^2}{\partial\mathbf{w}}$. Похідні квадратів векторів локальних градієнтів визначаються за формулами (тут розмірність виходу $O = 1$):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial w_\alpha^{(out)}} (\delta_j^{HID}(k)^2) = 2\delta_j^{HID}(k) f_j'(k-1) w_\alpha^{(out)} \delta^{OUT}, & j = \alpha, \\ \frac{\partial}{\partial w_\alpha^{(out)}} (\delta_j^{HID}(k)^2) = 0, & j \neq \alpha; \end{cases} \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial w_{\alpha\beta}^{(rec)}} (\delta_j^{HID}(k)^2) = 0; \quad (23)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial w_{\alpha\beta}^{(rec)}} (\delta_j^{HID}(k-n)^2) = 2\delta_j^{HID}(k-n) f_j'(k-n-1) \delta_\alpha^{HID}(k-n+1), & j = \beta, \\ \frac{\partial}{\partial w_{\alpha\beta}^{(rec)}} (\delta_j^{HID}(k-n)^2) = 0, & j \neq \beta; \end{cases} \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial w_\alpha^{(out)}} (\delta_j^{HID}(k-n)^2) = 2\delta_j^{HID}(k-n) f_j'(k-n-1) \sum_{i=1}^K w_{ij}^{(rec)} \frac{\partial}{\partial w_\alpha^{(out)}} (\delta_i^{HID}(k-n+1)), \quad (25)$$

де $n = 1, \dots, h$ – поточний горизонт зворотного поширення;

$f_j(k)$ – значення активаційних функцій прихованого шару на такті k ;

$\delta_j^{HID}(k)$ – локальний градієнт для j -го нейрона прихованого шару нейронів на такті k ;

$\delta^{OUT}(k)$ – локальний градієнт для вихідного нейрона прихованого шару нейронів на такті k .

Цього достатньо для випадку навчання нейроконтролера для випадку нейроуправління, коли було потрібно контролювати величину лише одного

компонента вектора локальних градієнтів (див. розділ 4), але в більш загальному випадку, для навчання рекурентних нейромереж, цей підхід показав нестійку збіжність навчання через протиріччя між членами функціоналу псевдорегуляризації (20), що відповідають за цільову задачу навчання і величини зворотно-поширених градієнтів. Для подолання цього протиріччя розроблено метод семплювання, в основі якого лежить ідея використання прикладів навчальної вибірки для керування нормою зворотнопоширених градієнтів.

Припустимо, що є мініпакет навчальних даних $d = \{\mathbf{u}_1; \mathbf{t}_1; \dots; \mathbf{u}_N; \mathbf{t}_{N_D}\}$, який містить N_D прикладів. Виконуються прямий і зворотний проходи нейромережі з використанням цього мініпакета, і обчислюється вектор корекції $d\mathbf{w}$. Потрібно перевірити вплив вектора корекції $d\mathbf{w}$ на посилення або зменшення ефекту зникнення/вибуху градієнтів. Зацікавленість у контролі норми векторів локальних градієнтів $\delta(\cdot)$ зумовлена тим, що матриці похідних похибки $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}}$ пропорційні векторам локальних градієнтів.

Нехай $\mathbf{w}_{rec}^{(l)}$ – це матриця вагових коефіцієнтів рекурентних зв'язків простої рекурентної нейромережі на поточній ітерації корекції вагів l . Припустимо також, що вже виконано прямий і зворотний проходи і обчислено поточну корекцію $d\mathbf{w}_{rec}$ для матриці рекурентних зв'язків: $\mathbf{w}_{rec}^{(l+1)} = \mathbf{w}_{rec}^{(l)} + d\mathbf{w}_{rec}$. Розглянемо функцію $S(\mathbf{w}_{rec}^{(l)})$, яка є квадратом евклідової норми вектора $\delta(k-h)$ (16) на ітерації l :

$$S(\mathbf{w}_{rec}^{(l)}) = \frac{1}{2} \|\delta(k-h, \mathbf{w}_{rec}^{(l)})\|_2^2. \quad (26)$$

Будемо вважати, що величина $\|d\mathbf{w}_{rec}^{(l)}\|_2^2$ мала, і тому розкладемо функцію $S(\mathbf{w}_{rec}^{(l+1)})$ в ряд Тейлора в околі поточної точки простору вагових коефіцієнтів:

$$S(\mathbf{w}_{rec}^{(l+1)}) = S(\mathbf{w}_{rec}^{(l)}) + dS + o(\|d\mathbf{w}_{rec}^{(l)}\|_2^2). \quad (27)$$

Лема. Лінійний член розкладання ряду Тейлора dS в (27) визначається скалярним добутком допоміжних векторів \mathbf{g} та $d\mathbf{g}$:

$$dS = (\mathbf{g}, d\mathbf{g}), \quad (28)$$

$$\mathbf{g} = \left(\prod_{i=h}^1 \text{diag}(f'(\mathbf{a}(k-i+1))) \mathbf{w}_{rec}^{(l)} \right) \delta^{(l)}(k), \quad (29)$$

$$d\mathbf{g} = \sum_{i=1}^h \left(\left(\prod_{j=h}^1 \text{diag}[f'(\mathbf{a}(k-j+1))] \mathbf{v} \right) \delta^{(l)}(k) \right), \quad (30)$$

$$\mathbf{v} = d\mathbf{w}_{rec}^{(l)}, \text{ if } i = j; \quad \mathbf{v} = \mathbf{w}_{rec}^{(l)}, \text{ if } i \neq j.$$

Теорема (достатні умови на збільшення і зменшення евклідової норми вектора градієнтів похибки). Нехай абсолютна величина $|dS| > o\left(\|d\mathbf{w}_{rec}^{(l)}\|_2^2\right) > 0$. Тоді достатньою умовою на збільшення $\|\delta^{(l+1)}(k-h)\|_2$ (евклідової норми вектора локальних градієнтів, зворотно-поширених на h кроків назад у часі від поточного моменту k) на наступній ітерації корекції вагів $l+1$ відносно $\|\delta^{(l)}(k-h)\|_2$ внаслідок застосування матриці корекції $d\mathbf{w}_{rec} \in dS > 0$, де dS визначається (28-30), $d\mathbf{w}_{rec}$ входить в dS , $\mathbf{w}_{rec}^{(l+1)} = \mathbf{w}_{rec}^{(l)} + d\mathbf{w}_{rec}$. Аналогічно, достатньою умовою на зменшення $\|\delta(k-h, \mathbf{w}_{rec}^{(l+1)})\|_2 \in dS < 0$. \square

Отримано теоретичні оцінки обчислювальної ефективності методу обчислення dS , що складає $O(H^2 N_w^3)$, та запропоновано швидкий метод диференціювання норми градієнта, заснованому на кешуванні, в якому складність обчислень складає $O(HN_w^3)$, тобто залежить лінійно від горизонту зворотного поширення H замість квадратичної залежності.

На основі виведених аналітичних умов для керування нормою градієнтів, розроблено метод семплювання для псевдорегуляризації градієнтів. Ідея цього методу полягає в відборі лише прийнятних елементів навчальної вибірки на поточній ітерації навчання. Для оцінки міри падіння градієнтів вводиться допоміжна змінна $Q(\delta, h)$, що носить назву Q-factor, яка дорівнює логарифму відношення норми векторів локальних градієнтів на початку $\delta(k)$ до норми локальних градієнтів у кінці виконання процедури ВРТТ $\delta(k-h)$:

$$Q(\delta, h) = \lg(\|\delta(k)\|) - \lg(\|\delta(k-h)\|). \quad (31)$$

Метод семплювання для псевдорегуляризації градієнтів. Припустимо, маємо вибірку $\{\mathbf{U}, \mathbf{T}\}$ для навчання нейромережі. Задамо апріорі допустимі межі падіння або зростання норми векторів локальних градієнтів, так звану «безпечну зону», визначивши діапазон $[Q_{MIN}; Q_{MAX}]$. Для кожного мініпакета $\mathbf{d}_i = \{\mathbf{u}_i; \mathbf{t}_i\}$, що містить N_{MD} прикладів з навчальної вибірки $\{\mathbf{U}, \mathbf{T}\}$:

- обчислити диференціал dS (28); якщо $abs(dS) > 1$, ігнорувати цей мініпакет;
- виконати прямий і зворотній прохід нейромережі, обчислити $Q(\delta, h)$ за (27);
- якщо $Q(\delta) \in [Q_{MIN}; Q_{MAX}]$ вважати падіння (зростання) градієнтів задовільним; використати наявний мініпакет \mathbf{d}_i для отримання похідних $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}}$ і навчання нейромережі;
- інакше, якщо 1) $Q(\delta, h) < Q_{MIN}$ і $dS > 0$ або 2) $Q(\delta, h) > Q_{MAX}$ і $dS < 0$, використати наявний мініпакет для навчання, інакше – ігнорувати цей мініпакет.

Для тестування здатності рекурентних нейромереж працювати з довгостроковою динамікою було використано відомий бенчмарк, запропонований дослідниками J. Schmidhuber і S. Hochreiter, і який фактично став стандартом для дослідників, що розробляють алгоритми навчання рекурентних нейромереж: “Adding”, “Multiplication”, “Temporal order”, “Temporal order 3-bit”.

За умовою задачі “Adding”, нейромережа послідовно отримує на вхід вектори, що мають дві компоненти (рис. 3). Перша компонента («шум») містить випадкові значення, а друга компонента («маркер») – нулі, за виключенням двох випадково визначених у часі моментів, коли ця компонента приймає значення “1”.

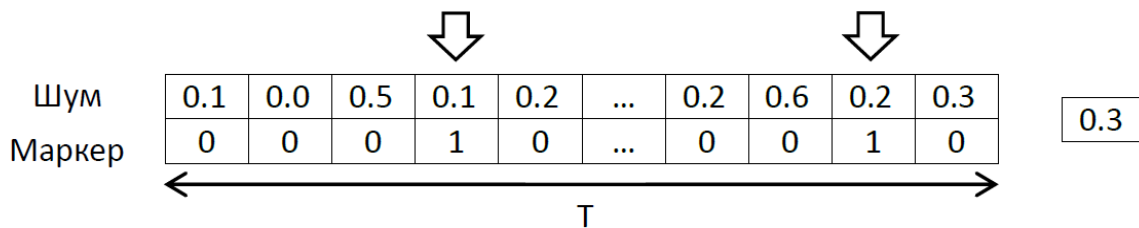


Рисунок 3 – Задача “Adding”

Метою навчання нейромережі є апроксимація суми тих двох шумових сигналів, які відповідають маркерам “1” після обробки всієї послідовності. Задача “Multiplication” ідентична задачі “Adding”, але в ній відповідно замість додавання використовується операція множення. В задачах “Temporal order” і “Temporal order 3-bit” оцінюється здатність нейромережі запам’ятовувати, в якому порядку в зашумленій вхідній послідовності знаходяться рознесені в часі символи $\{A, B\}$ або $\{A, B, C\}$ відповідно.

Таблиця 3 – Відносна кількість правильних відповідей навчених нейромереж для різних задач, що містять довгострокові залежності, без псевдорегуляризації (звичайний спосіб навчання) та з псевдорегуляризацією (запропонований спосіб)

	Adding		Multiplication		Temporal order		Temporal order 3-bit	
	best	mean	best	mean	best	mean	best	mean
Без псевдорег., T = 100	99%	68%	>99%	72%	96%	44%	>99%	50%
З псевдорег., T = 100	>99%	96%	>99%	68%	>99%	60%	>99%	62%
Без псевдорег., T = 150	34%	11%	-	-	51%	30%	32%	24%
З псевдорег., T = 150	47%	13%	-	-	72%	42%	37%	30%

У **четвертому розділі** розроблено метод підвищення якості навчання нейроконтролерів у методі нейроуправління з еталонною моделлю за рахунок використання розробленого методу псевдорегуляризації.

Метод нейроуправління з еталонною моделлю містить 3 етапи:

- 1) навчання в режимі офф-лайн першої нейромережі, нейроеммулятора, для моделювання динаміки об'єкта управління;
- 2) навчання в режимі он-лайн другої нейромережі, нейроконтролера, управляти об'єктом управління;
- 3) використання навченого нейроконтролера для управління об'єктом (нейроеммулятор на цьому етапі не використовується).

У роботі розглядається задача управління нелінійним динамічним об'єктом другого порядку, динаміка якого задається формулою

$$y(k+1) = \frac{y(k)y(k-1)y(k-2)u(k-1)[y(k-2)-1]+u(k)}{1+y(k-1)^2+y(k-2)^2}, \quad (32)$$

де $u(k)$ – вхідний сигнал;

$y(k+1)$ – вихідний сигнал на такті k .

Також проводились експерименти з реальним нелінійним динамічним об'єктом «система магнітної левітації» у дистанційному змаганні Automatic Control Telelab.

Навчання нейроконтролера виконується в режимі он-лайн, паралельно з управлінням об'єктом. Схема методу нейроуправління показана на рис. 4.

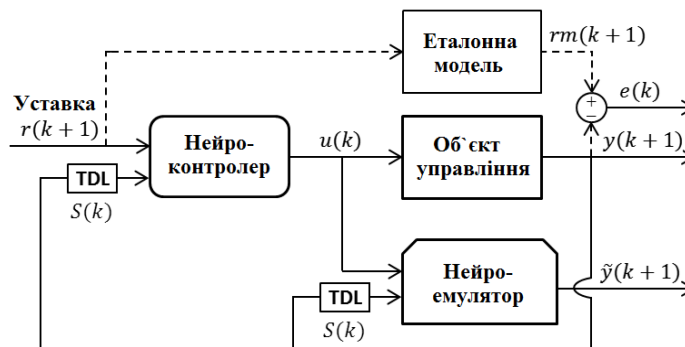


Рисунок 4 – Схема нейроуправління з еталонною моделлю

Для навчання нейроконтролера похибка управління $e(k)$ пропускається через навчений нейроеммулятор у зворотному напрямку за методом зворотного поширення похибки, при цьому корекція вагів нейроеммулятора не виконується. Для вхідних нейронів нейроеммулятора розраховується поточний вектор локальних градієнтів $\delta^{IN} = [\delta_1 \dots \delta_{N+L+2}]$, з компонентів якого обирається «керуючий локальний градієнт» δ_u , що відповідає нейрону нейроеммулятора, на який надходить управління $u(k)$,

$$\delta_u = \sum_{n=1}^K w_{j1}^{(1)} f'(z_j) \sum_{m=1}^L w_{mj}^{(2)} \delta_m^{OUT}. \quad (33)$$

У дисертаційній роботі було виявлено, що прихованою проблемою навчання нейроконтролерів у методі нейроуправління з еталонною моделлю є проблема зникнення градієнтів, яка раніше, головним чином, асоціювалася з рекурентними та

глибокими нейромережами. Було експериментально показано, що лише точного навчання нейроемуляторів моделюванню прямої динаміки об'єкта управління недостатньо для якісного навчання нейроконтролерів через ефект зникнення градієнтів.

Було розроблено метод псевдорегуляризації градієнтів для навчання нейроемуляторів, заснований на модифікації мініпакетного фільтра Калмана, що забезпечує краще навчання нейроконтролерів. Ідея полягає в мінімізації у процесі навчання нейроемулятора функціонала $L(\mathbf{w})$:

$$L(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda(1 - \delta_u(\mathbf{w}))^2, \quad (34)$$

де $E(\mathbf{w})$ – середньоквадратична похибка моделювання об'єкта;

δ_u – керуючий локальний градієнт (33);

λ – коефіцієнт, що регулює вклад псевдорегуляризації.

Для мінімізації функціонала (34) запропоновано модифікацію методу навчання розширеного фільтра Калмана для виконання багатокритеріальної задачі оптимізації, де величина δ_u^2 вважається додатковим виходом моделі динамічного процесу навчання, що обчислюється під час зворотного поширення похибки, для неї обчислюються додаткові похідні $\frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w}$.

Продиференціюємо квадрат керуючого локального градієнта (33) за ваговими коефіцієнтами прихованого і вихідного шарів (тут кількість виходів $O = 1$):

$$\begin{cases} \frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w^{(1)}_{j1}} = 2\delta_u f'(z_j) w^{(2)}_j \delta^{OUT}, \\ \frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w^{(1)}_{jn}} = 0, \text{ для } n \neq 1, \end{cases} \quad (35)$$

$$\frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w^{(2)}_I} = 2\delta_u f'(z_I) w^{(1)}_{I1} \delta^{OUT}. \quad (36)$$

Матриця спостережень $\hat{\mathbf{H}}(k)$ і матриця нев'язок $\hat{\mathbf{E}}(k)$ для навчання методом розширеного фільтра Калмана тепер приймають вигляд

$$\hat{\mathbf{H}}(k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w_1} & \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial \hat{y}(k)}{\partial w_N} \\ \frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w_1} & \frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial(\delta_u^2)}{\partial w_N} \end{bmatrix}^T. \quad (37)$$

$$\hat{\mathbf{E}}(k) = [e(k) \quad \lambda(1 - \delta_u^2)]. \quad (38)$$

З результатів експериментів випливає, що використання запропонованого методу регуляризації градієнтів, який дозволяє штучно підсилити локальні градієнти на нейронах, що отримують керуючий сигнал від нейроконтролера, поліпшує якість навчання нейроконтролерів нелінійними об'єктами управління другого порядку на 40-60% (табл. 4).

Таблиця 4 – Якість управління нейроконтролерів на тестовій ділянці, навчених з використанням нейроемулаторів без регуляризації градієнтів і з регуляризацією градієнтів різної сили впливу λ , похибка IAE (Integrational Absolute Error)

Метод навчання	Без регуляризації градієнтів	$\lambda=0,01$	$\lambda=0,015$	$\lambda=0,02$	$\lambda=0,025$	$\lambda=0,03$
Похибка IAE, мін.	0,00373	0,00218	0,00222	0,00221	0,00220	0,00166
Похибка IAE, серед.	0,06995	0,01757	0,01342	0,03545	0,02039	0,03245

У **висновках** сформульовані основні наукові результати дисертаційної роботи.

У **додатках** наведені акти впровадження результатів дисертаційної роботи.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв'язана актуальна наукова задача удосконалення методів навчання нейронних мереж прогнозуванню часових послідовностей, що містять довгострокові залежності, та управління динамічними об'єктами. Розроблено, аналітично та експериментально досліджено методи навчання динамічних нейронних мереж. Розроблені методи забезпечують підвищення якості роботи динамічних нейромереж, що підтверджено експериментами на синтетичних та реальних даних в задачах прогнозування часових рядів та управління нелінійними динамічними об'єктами.

Основні наукові результати роботи є такі:

1. Проведено порівняльний аналіз існуючих архітектур динамічних нейронних мереж, методів їх навчання та методів нейроуправління. Експериментально перевірено вплив вибору архітектури динамічних нейромереж на точність довгострокового прогнозування. Показано, що для однокрокових прогнозів динамічні нейромережі з лінією затримок значно випереджають рекурентні нейромережі. Рекурентні нейромережі випереджають динамічні нейромережі прямого поширення для задач, в яких ключовим фактором є виявлення послідовностей довгострокових причинно-наслідкових залежностей. Головною проблемою при навчанні рекурентних нейромереж довгостроковим залежностям є ефект зникнення градієнтів.

2. Вперше запропоновано метод псевдoreгуляризації градієнтів для контролю норми зворотнопоширених градієнтів при навчання простих рекурентних

нейромереж. Метод дозволяє тримати величини зворотно-поширених градієнтів похибки в прийнятних межах, що забезпечує зменшення впливу ефекту зникнення градієнтів та посилює здатність нейромережі підтримувати довгострокову пам'ять всередині рекурентних зв'язків без модифікації архітектури нейромережі. Це поліпшує точність прогнозування рекурентних нейромереж на даних, що містять довгострокові причинно-наслідкові залежності.

3. Аналітично виведено достатні умови на збільшення і зменшення евклідової норми вектора локальних градієнтів похибки в процесі навчання простих рекурентних нейромереж. Розроблено швидкий метод дифференціювання норми вектора зворотнопоширених локальних градієнтів похибки, заснований на кешуванні, отримано теоретичні оцінки його обчислювальної складності. Обчислювальна складність залежить лінійно від горизонту зворотного поширення замість квадратичної залежності раніше.

4. Розроблено метод семплювання для регуляризації градієнтів, що за рахунок відбору придатних для навчання на поточній ітерації прикладів вибірки забезпечує збіжність навчання. Експериментально показано підвищення точності прогнозування простими рекурентними нейромережами довгострокових (150 кроків) залежностей на тестових базах: Adding problem – з 34% до 47%, Temporal order problem – з 51% до 72%, Temporal order 3-bit problem – з 32% до 37% правильних відповідей.

5. Розроблено метод навчання нейроконтролерів у нейроуправлінні з еталонною моделлю шляхом застосування методу псевдорегуляризації для керування нормою зворотнопоширених градієнтів і подолання проблеми зникнення градієнтів при навчанні нейроемуляторів. Це дозволяє підвищити якість навчання нейроконтролерів і в підсумку забезпечити зменшення інтегральної абсолютної похибки управління на тестовій ділянці нелінійним динамічним об'єктом 2-го порядку на 40-60% (наприклад, з $3,7 \cdot 10^{-3}$ до $2,1 \dots 1,6 \cdot 10^{-3}$) і на 2,4% у порівнянні з ПД-контролером (з $2,13 \cdot 10^{-2}$ до $2,08 \cdot 10^{-2}$) при управлінні системою магнітної левітації у дистанційному змаганні Automatic Control Telelab.

6. Розроблено метод навчання динамічних нейромереж прямого поширення з лінією затримок на основі розширеного фільтра Калмана, який відрізняється введенням в функціонал навчання в явному вигляді похибки багатокрокової прогнозованої траєкторії, що забезпечує кращу точність багатокрокового прогнозування. Зменшення середньоквадратичної похибки прогнозування на тестовій вибірці становить від 20% до 80% для прогнозів часових рядів, що містять хаотичну динаміку (наприклад, на бенчмарках Laser Santa Fe та Maskey-Glass, горизонт 14 кроків); та від 10% до 50% на курсах банківських металів НБУ (горизонт 16 кроків на потижневому графіку).

7. Створено програмне забезпечення, що реалізує розроблені методи навчання динамічних нейромереж та нейроконтролерів та може застосовуватися як модулі програмних комплексів або як самостійні модулі в системах прогнозування і управління. Практична значимість розробок підтверджується двома актами впровадження.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Chernodub A. Training Neural Networks for Classification using the Extended Kalman Filter: A Comparative Study / A. Chernodub // *Optical Memory and Neural Networks*. – 2014. – Vol. 23, Issue 2. – P. 96 – 103.
2. Чернодуб А. Н. Обучение нейроэмуляторов с использованием псевдорегуляризации для метода нейроруправления с эталонной моделью / А. Н. Чернодуб // *Искусственный интеллект*. – 2012. – № 4. – С. 602 – 614.
3. Чернодуб А. М. Навчання рекурентних нейронних мереж методом псевдорегуляризації для багатокрокового прогнозування часових рядів / А. М. Чернодуб // *Математичні машини і системи*. – 2012. – № 4. – С. 41 – 51.
4. Чернодуб А. М. Вибір нейроэмулятора на основі методу керуючих локальних градієнтів у методі нейрорування з еталонною моделлю / А. М. Чернодуб // *Математичні машини і системи*. – 2012. – № 3. – С. 61 – 68.
5. Chernodub A. Local Control Gradients Criterion for Selection of Neuroemulators for Model Reference Adaptive Neurocontrol / A. Chernodub // *Optical Memory and Neural Networks*. – 2012. – Vol. 21, Issue 2. – P. 126 – 131.
6. Чернодуб А. Н. Обзор методов нейрорувления / А. Н. Чернодуб, Д. А. Дзюба // *Проблемы программирования*. – 2011. – № 2. – С. 79 – 94.
7. Дзюба Д. О. Застосування методу контрольованого збурення для модифікації нейроконтролерів у реальному часі / Д. О. Дзюба, А. М. Чернодуб // *Математичні машини і системи*. – 2011. – № 1. – С. 20 – 28.
8. Chernodub A. Direct Method for Training Feed-Forward Neural Networks Using Batch Extended Kalman Filter for Multi-Step-Ahead Predictions / A. Chernodub // *International Conference on Artificial Neural Networks and Machine Learning ICANN'2013, (Sofia, Bulgaria, 10–13 September 2013). Lecture Notes in Computer Science*. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2013. – Vol. 8131. – P. 138 – 145.
9. Чернодуб А.Н. Пакет для обучения динамических нейронных сетей методом расширенного фильтра Калмана "Extended Kalman Filtering Neural Network Toolbox / А.Н. Чернодуб // *Материалы междунар. науч. конф. "Интеллектуальные системы принятия решений и проблемы вычислительного интеллекта" ISDMCI'2013, (Евпатория, 20–24 мая 2013 г.)*. – Херсон: ХНТУ, 2013. – С. 511 – 513.
10. Chernodub A. Training Neuroemulators Using Multicriteria Extended Kalman Filter and Pseudoregularization for Model Reference Adaptive Neurocontrol / A. Chernodub // *IEEE IV International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems (ICUMT'2012), (St. Petersburg, Russia, 3 – 5 October 2012)*. – St. Petersburg, Russia, 2012. – P. 397 – 402.
11. Чернодуб А.Н. Обучение рекурентных нейронных сетей методом псевдорегуляризации для многошагового прогнозирования на примере хаотического процесса Маккея-Гласса / А. Н. Чернодуб // *Problems of Computer in Intellectualization. ITHEA® and V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of NASU*. – Kiev, Ukraine – Sofia, Bulgaria, 2012. – P. 141 – 151.

12. Чернодуб А. Н. Критерий выбора нейроэмуляторов на основе локальных градиентов в методе управления с эталонной моделью / А. Н. Чернодуб // Сб. науч. трудов XIV конф. "Нейроинформатика-2012", (Москва, РФ, 23–27 января 2012 г.). Ч. 3. – М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – С. 214 – 223.

13. Чернодуб А. Н. Прогнозирование временных рядов на основе одиночных нейронных сетей и комитетов нейронных сетей: сравнительный эксперимент / А. Н. Чернодуб, Д. А. Дзюба, Д. В. Новицкий // Сб. науч. трудов XIII конф. "Нейроинформатика-2011", (Москва, РФ, 24–28 января 2011 г.). Ч. 2. – М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – С. 192 – 201.

14. Chernodub A. Training Dynamic Neural Networks Using the Extended Kalman Filter for Multi-Step-Ahead Predictions / A. Chernodub // Artificial Neural Networks Methods and Applications in Bio-Neuroinformatics / P. Koprinkova-Hristova, V. Mladenov, N.K. Kasabov (eds.). – Springer International Publishing Switzerland, 2015. – Vol. 4. – P. 221 – 244.

АНОТАЦІЯ

Чернодуб А. М. Навчання динамічних нейронних мереж на задачах довгострокового прогнозування. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.23 – системи та засоби штучного інтелекту. – Інститут проблем математичних машин і систем НАН України, Київ, 2016.

Дисертаційну роботу присвячено проблемі навчання динамічних нейронних мереж для задач прогнозування часових рядів і керування динамічними об'єктами. Проведено аналіз існуючих архітектур і методів навчання динамічних нейромереж і методів нейроуправління, в результаті чого запропоновано способи вдосконалення виявлення довгострокових залежностей у навчальній вибірці для нейромереж прямого поширення з лінією затримок на вході і рекурентних нейромереж. Для нейромереж прямого поширення розроблено метод навчання «прогнозуюче поширення в часі», що дозволяє збільшити точність багатокрокових прогнозів. Для рекурентних нейромереж розроблено метод псевдорегуляризації градієнтів для керування нормою сигналу зворотного поширення у часі, що дозволяє зменшити ефект зникнення градієнтів і збільшити точність довгострокових прогнозів. Розроблений метод псевдорегуляризації градієнтів було адаптовано для задач нейроуправління. Розроблено метод керування нормою градієнтів під час навчання нейроэмуляторів, що дозволяє підвищити якість навчання нейроконтролерів за рахунок подолання проблеми зникнення градієнтів у зв'язці «нейроконтролер + нейроэмулятор», що представляє собою глибоку нейронну мережу.

Ключові слова: багатокрокове прогнозування, рекурентні нейронні мережі, ефект зникнення градієнта, зворотне поширення в часі, нейроуправління.

АННОТАЦИЯ

Чернодуб А. Н. Обучение динамических нейронных сетей на задачах долгосрочного прогнозирования. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата технических наук по специальности 05.13.23 – системы и средства искусственного интеллекта. – Институт проблем математических машин и систем НАН Украины, Киев, 2016.

Диссертационная работа посвящена проблеме обучения динамических нейронных сетей для задач прогнозирования временных рядов и управления динамическими объектами. Проведен анализ существующих архитектур нейросетей и методов их обучения, а также методов нейроуправления динамическими объектами. Рассмотрены основные архитектуры динамических нейронных сетей на основе многослойного перцептрона: динамический многослойный перцептрон (Dynamic Multilayer Perceptron), простая рекуррентная сеть (Simple Recurrent Network), нейросеть нелинейной авторегрессии с внешними входами (Nonlinear AutoRegression with eXternal inputs). Проанализированы методы оптимизации для обучения нейросетей на основе градиентного спуска и расширенного фильтра Калмана.

Проанализированы базовые способы предоставления статическим нейросетям способности оперировать с динамическими данными: добавление «линий задержек» для учета ретроспективных данных и добавления рекуррентных связей в структуру нейросети. Добавление линий задержек является более простым способом, однако характерная длина зависимостей в данных полностью определяется априорно. Добавление рекуррентных связей является потенциально более мощным способом «динамизации» статических нейросетей, однако выявлению долгосрочных зависимостей мешает эффект взрыва/исчезновения градиентов (exploding/vanishing gradients), когда градиенты ошибки экспоненциально увеличиваются или уменьшаются до нуля при пропускании ошибки через развернутую назад во времени (Backpropagation Through Time, BPTT) нейросеть.

Для нейросетей прямого распространения с линиями задержек разработан метод обучения «прогнозирующего распространения во времени», который позволяет улучшить точность итеративных многошаговых прогнозов на 10-80%. Идея метода состоит в модификации метода обучения расширенного фильтра Калмана для оптимизации в явном виде ошибки многошагового прогнозирования, содержащей долговременные зависимости путем включения ее в функционал оптимизации в явном виде.

Для простых рекуррентных нейросетей разработан метод псевдорегуляризации градиентов. В этом случае нейросеть обучается не только решению целевой задачи обучения, но и поддержанию нормы векторов градиентов в допустимых пределах, что повышает способность нейросети обучаться долговременным зависимостям. Это осуществляется путем модификации целевой функции обучения для выполнения многокритериальной оптимизации путем добавления дополнительного члена, который отвечает за величину обратно-распространенных градиентов. Были получены достаточные аналитические условия увеличения или уменьшения нормы обратно-распространенных градиентов за счет

использования примеров в процессе обучения. На основе выведенных аналитических условий для управления нормой градиентов разработан метод псевдорегуляризации градиентов на основе семплирования, при котором управление нормой градиентов осуществляется путем выбора адекватных примеров из обучающей выборки, что позволяет избежать противоречия между функцией минимизации среднеквадратичной ошибки и ошибки псевдорегуляризации градиентов. Уменьшение среднеквадратичной ошибки прогнозирования для простых рекуррентных нейросетей на долгосрочных (до $T = 150$ шагов) зависимостях составляет: Adding problem – с 34% до 47%, Temporal order problem – с 51% до 72% , Temporal order 3-bit problem – с 32% до 37% правильных ответов.

Предложенный для рекуррентных нейросетей метод псевдорегуляризации градиентов был адаптирован и применен для задач нейроруления. Было выявлено, что скрытой проблемой обучения нейроконтроллеров в методе нейроруления с эталонной моделью является проблема исчезновения градиентов, поскольку связка нейросетей «нейроконтроллер + нейроэмулятор» фактически представляют собой глубокую нейросеть. Разработан метод управления нормой градиентов во время обучения нейроэмуляторов, который позволяет повысить качество нейроруления на 40-60%.

Ключевые слова: многошаговое прогнозирование, рекуррентные нейросети, эффект исчезновения градиента, обратное распространение во времени, нейроруление.

ABSTRACT

Chernodub A.N. Training the dynamic neural networks for long-term predictions. – Manuscript.

Thesis for the Ph.D. scientific degree in technical sciences, specialty 05.13.23 – systems and tools of artificial intelligence. – Institute of Mathematical Machines and Systems Problems of National Academy of Sciences of Ukraine, Kiyv, 2016.

The thesis is dedicated to the problems of training dynamic neural networks for forecasts of time series and control of non-linear dynamic plants. Analysis of current dynamic neural network architectures, methods of their training and methods of neurocontrol were performed. As a result, novel methods were proposed for learning long-term dependencies in the training data for feedforward neural networks with tapped delay lines and in recurrent neural networks. For feedforward networks, a method called “Forecasted Propagation Through Time” was developed for increasing the accuracy of multi-step-ahead predictions. For recurrent networks, a pseudoregularization method was developed. It controls the norm of backpropagated gradients and prevents the vanishing gradients effect that decreases long-term memory inside the recurrent networks. This method of gradient pseudoregularization was also adopted to the neurocontrol problem. Controlling the norm of backpropagated gradients inside neuroemulators increases the quality of training neurocontrollers by removing the vanishing gradients effect in the deep “neuroemulator + neurocontroller” neural network bundle.

Keywords: multi-step-ahead forecasting, recurrent neural networks, vanishing gradients effect, backpropagation through time, neurocontrol.