



Российская Академия Наук

А Т АВТОМАТИКА И ТЕЛЕМЕХАНИКА

Журнал основан в 1936 году

Выходит 12 раз в год

12

декабрь

Москва

2022

Учредители журнала:

Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН,
Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН (ИПУ РАН),
Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН (ИППИ РАН)

Главный редактор:

Галяев А.А.

Заместители главного редактора:

Соболевский А.Н., Рубинович Е.Я., Хлебников М.В.

Ответственный секретарь:

Родионов И.В.

Редакционный совет:

Васильев С.Н., Желтов С.Ю., Каляев И.А., Кулешов А.П., Куржанский А.Б.,
Мартынюк А.А. (Украина), Пешехонов В.Г., Поляк Б.Т., Попков Ю.С.,
Рутковский В.Ю., Федосов Е.А., Черноусько Ф.Л.

Редакционная коллегия:

Алескеров Ф.Т., Бахтадзе Н.Н., Бобцов А.А., Виноградов Д.В., Вишневский В.М.,
Воронцов К.В., Глумов В.М., Граничин О.Н., Губко М.В., Каравай М.Ф.,
Кибзун А.И., Краснова С.А., Красносельский А.М., Крищенко А.П.,
Кузнецов Н.В., Кузнецов О.П., Кушнер А.Г., Лазарев А.А., Ляхов А.И.,
Маликов А.И., Матасов А.И., Меерков С.М. (США), Миллер Б.М.,
Михальский А.И., Мунасыпов Р.А., Назин А.В., Немировский А.С. (США),
Новиков Д.А., Олейников А.Я., Пакшин П.В., Пальчунов Д.Е.,
Поляков А.Е. (Франция), Рапопорт Л.Б., Рублев И.В., Степанов О.А.,
Уткин В.И. (США), Фрадков А.Л., Хрусталева М.М., Цыбаков А.Б. (Франция),
Чеботарев П.Ю., Щербаков П.С.

Адрес редакции: 117997, Москва, Профсоюзная ул., 65

Тел./факс: (495) 334-87-70

Электронная почта: redacsia@ipu.ru

Зав. редакцией *Е.А. Мартехина*

Москва

ООО «Тематическая редакция»

ВСТУПИТЕЛЬНОЕ СЛОВО

DOI: 10.31857/S0005231022120017, EDN: KREMGС

В данном номере журнала представлены статьи, подготовленные на основе докладов, прочитанных на конференции «Математические методы распознавания образов» (ММРО-2021), посвященной памяти академика К.В. Рудакова. Первая часть статей была опубликована в № 10, 2022.

В статье Гришина В.А. «Задача формирования покрытия области неопределенности эталонами для систем оптической навигации» рассматривается процесс управления стыковкой некооперируемых космических аппаратов.

В работе Скачкова Н.А., Воронцова К.В. «Улучшение качества машинного перевода с использованием обратной модели» рассмотрены проблемы компьютерного перевода текстов. Машинный перевод — это задача обработки текстов естественного языка, ставящая своей целью перевод входного текста с одного языка на другой язык в автоматическом режиме. В данной работе рассматриваются подходы, использующие переводные модели обратных языковых направлений и улучшающие согласованность между переводами одного текста с помощью прямых и обратных им моделей перевода. В работе представлено общее теоретическое обоснование для таких методов с точки зрения решения задачи максимизации правдоподобия, а также предложен способ стабильного обучения современных моделей с использованием циклических переводов.

В статье Дюличевой Ю.Ю. «Выявление аффективных состояний на основе автоматического анализа текстов комментариев в социальных сетях» рассмотрена задача классификации 3553 англоязычных комментариев из социальной сети Reddit на основе различных подходов к векторизации текстов комментариев: мешок слов, TF-IDF, анализ биграмм на основе поточечной взаимной информации PMI и сентимента, глубокая модель представления языка BERT. Применение гибридного подхода с использованием векторизации текстов на основе BERT и анализа биграмм позволило повысить качество классификации до 91%.

В работе Королева Н.С., Сенько О.В. «Метод повышения эффективности обучения градиентного бустинга, основанный на модифицированных функциях потерь» рассматривается новый метод повышения качества обучения градиентного бустинга, а также увеличения его обобщающей способности, основанный на использовании модифицированных функций потерь.

¹ Статьи с 3 стр. по 140 стр. являются окончанием тематического выпуска № 10, 2022 г.

В статье Хрыльченко К.Я., Воронцова К.В. «Оптимизация весов модальностей в тематических моделях транзакционных данных» рассматривается актуальная задача обучения мультимодальных тематических моделей. Одной из основных проблем при обучении моделей такого вида является поиск оптимальных весов модальностей. Авторами предложен и теоретически обоснован новый вычислительно эффективный метод нахождения “сбалансированных” весов модальностей, который решает проблему “доминирующих модальностей”. Предложенный метод экспериментально исследован на задаче предсказания 90-дневной просрочки выплат по кредиту. Авторами показано, что данный метод превосходит по качеству как стандартные мультимодальные модели, так и лучшую по качеству унимодальную модель.

Статья Ерохина В.И., Кадочникова А.П., Сотникова С.В. «Достаточные условия значимости коэффициентов линейных моделей и полиномиальной сложности их определения по данным с интервальной неопределенностью» посвящена исследованию свойств интервальных систем линейных алгебраических уравнений, которые, в частности, возникают при построении линейной регрессии по данным с интервальной неопределенностью. Авторский вклад состоит в формулировке и доказательстве теоремы о достаточных условиях, при которых допустимая область интервальной системы линейных алгебраических уравнений является выпуклым ограниченным многогранником, целиком принадлежащим одному ортанту.

В работе Берикова В.Б. «Модель и метод построения разнородного кластерного ансамбля» рассматривается задача кластеризации данных с помощью разнородного ансамбля с использованием матрицы коассоциации. Формулируется вероятностная модель, учитывающая коррелированность оценочных функций, с помощью которой находятся соотношения между характеристиками ансамбля и показателями качества итогового решения. Найдено выражение для оптимальных весов базовых алгоритмов, для которых минимальна верхняя граница оценки вероятности ошибки кластеризации.

В работе Анциперова В.Е. «Генеративная модель автокодировщиков, самообучающихся на изображениях, представленных выборками отсчетов», обосновывается концепция автокодировщиков, ориентированных на автоматическую генерацию сжатых изображений. Предлагаемый подход к задаче синтеза подобных автокодировщиков опирается на методы и принципы машинного обучения, понимаемого здесь как обучение по выборке из самих же данных. Для этих целей разработано специальное представление изображений с помощью выборок отсчетов контролируемого размера (выборочных представлений).

Лазарев А.А.

© 2022 г. Ю.Ю. ДЮЛИЧЕВА, канд. физ.-мат. наук
(dyulichevayuyu@cfuv.ru)
(ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет
им. В.И. Вернадского», Симферополь)

ВЫЯВЛЕНИЕ АФФЕКТИВНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ОСНОВЕ АВТОМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ТЕКСТОВ КОММЕНТАРИЕВ В СОЦИАЛЬНЫХ СЕТЯХ

В статье рассмотрена задача классификации 3553 англоязычных комментариев из социальной сети Reddit на основе различных подходов к векторизации текстов комментариев: мешок слов, TF-IDF, анализ биграмм на основе точечной взаимной информации PMI и сентимента, глубокая модель представления языка BERT. Применение гибридного подхода на основе векторизации текстов с помощью BERT и анализа биграмм позволило повысить качество классификации комментариев до 91%. На основе кластерного анализа 1857 англоязычных комментариев, содержащих описание тревожностей, с помощью BERT+k-Means были выделены кластеры. В исследовании предложен гибридный подход, основанный на применении метода тематического моделирования LDA, метода анализа тональности VADER, точечной взаимной информации, анализа частей речи и позволяющий выделять биграммы и триграммы для описания кластеров комментариев. Для визуализации извлеченных закономерностей в виде триграмм был построен граф знаний, описывающий предметную область, а сопоставление слов выделенных целевых триграмм со словами кастомного словаря, описывающего различные аффективные расстройства, позволило определить типы психосоциологических стрессоров, с которыми связаны аффективные расстройства.

Ключевые слова: биграммы, сентиментный анализ, LDA, BERT, VADER, WoW, TF-IDF, граф знаний, ментальное здоровье.

DOI: 10.31857/S0005231022120029, **EDN:** KRIUIZ

1. Введение

Анализ негативных настроений на основе текстов комментариев в социальных медиа, связанных с проявлением страха, тревожности, скуки, печали и т.п. является перспективным направлением для оценивания состояния ментального здоровья, в целом, и выявления различных аффективных состояний, в частности. Некоторые исследователи отмечают, что в социальных сетях люди описывают проблемы, симптомы и проявление своей ментальной болезни более свободно, чем на приеме у врача [1, 2]. По этой причине наблюдается рост интереса со стороны исследователей к применению методов обработки естественного языка для выявления закономерностей в текстах

комментариев, характерных для различных типов расстройств и их диагностики. Копперсмит и др. выявили преобладание личных местоимений первого лица в депрессивных комментариях на основе анализа частей речи [3]; Сарсам и др. отмечают преобладание эмоциональных состояний, связанных с выражением печали в сообщениях суицидального характера [4]. Некоторые исследователи отмечают, что измененное эмоциональное состояние и желание намеренно исказить смысл влияют на лингвистические показатели текста, которые могут быть использованы на этапе векторизации текстов комментариев для улучшения качества классификации [5, 6].

Пандемия COVID-19 и, в частности, самоизоляция, масочный режим и вакцинация привели к росту проявления аффективных состояний в комментариях социальных сетей. Так, Зенг и др. исследовали влияние пандемии COVID-19 на выражение депрессивных эмоций в твиттах [7]; Саифуллах и др. продемонстрировали эффективность применения случайного леса совместно с подходом к векторизации на основе TF-IDF для классификации тревожных комментариев на Youtube, связанных с COVID-19 [8].

Разработка новых методов анализа текстов комментариев в области исследования ментального здоровья направлена не только на выявление комментариев, относящихся к различным видам аффективных расстройств, но и на создание систем поддержки принятия решений по оказанию персонализированной помощи людям, страдающим такими расстройствами. Интерес представляет и задача определения той точки невозврата в сообщениях, когда негативное эмоциональное состояние и негативное отношение ко всем аспектам жизни приводят к суицидальной идеации [4].

Целью работы является исследование эффективности применения различных подходов к векторизации текстов комментариев и, в частности, на основе анализа биграмм для решения задач классификации и кластеризации комментариев с описанием различных аффективных расстройств, а также выявление закономерностей, способствующих пониманию психосоциологических стрессоров, с которыми связаны аффективные расстройства.

2. Обзор литературы по тематике исследования

Наиболее исследованной платформой социальных медиа с точки зрения выявления аффективных расстройств на основе анализа текстов комментариев является Твиттер. В табл. 1 приведены некоторые исследования, направленные на извлечение закономерностей из твиттов, способствующих улучшению качества классификации аффективных комментариев.

Волк и др. продемонстрировали эффективность классификации текстов комментариев с учетом сентимента и выявления депрессивных состояний на основе анализа колл-грамм и модели представления языка BERT [5], а Мойин и др. отмечают, что векторизация на основе биграмм существенно увеличивает качество классификации в отличие от использования триграмм [11], поэтому исследование авторов было направлено на выявление би-

Таблица 1. Анализ твиттов для выявления некоторых типов аффективных расстройств

Авторы	Тип аффективного расстройства	Датасет	Особенности	Методы анализа текстов	Результаты
1	2	3	4	5	6
Бирджали и др. [1]	суицидальное расстройство	892 твитта со словами из словаря суицидальных слов	Авторский словарь слов, связанных с суицидальным настроением (мыслями) и оценка семантической схожести на основе WordNet	Векторизация текстов на основе признаков частотности, анализа n-грамм и распознавания частей речи, классификация твиттов на основе SVM, ME и NB	Наибольшая точность классификации (precision) 89,5% достигнута на основе SMO
Рабани и др. [2]	суицидальное расстройство	4266 твиттов	Применение ансамблей методов машинного обучения	Векторизация на основе BoW, TF-IDF, классификация твиттов на основе беггинга, ансамбля голосования, AdaBoost, случайного леса, стекинга	Наибольшая точность классификации (accuracy) 98,5% достигнута на основе случайного леса
Сарсам и др. [4]	суицидальное расстройство	4987 твиттов, из них 1000 твиттов (для обучения модели) из двух классов: твитты с проявлением суицидальных мыслей и обычные твитты	Использование sentimentных признаков, выявленных на основе NRC Affect Intensity Lexicon и SentiStrength	Векторизация на основе мешка слов (BoW), методы на основе лексикона, алгоритмы классификации YATSI и LLGC	Наибольшая точность классификации (accuracy) 86,97% достигнута на основе YATSI+ sentimentные признаки

Таблица 1. (окончание)

1	2	3	4	5	6
Пиллай и др. [9]	стрессовое/расслабленное состояние	1000 твиттов	Введение шкалы баллов для оценивания экспертами степени стрессового/расслабленного состояния и исследование неоднозначности смысла слов	Предобработка текста твиттов на основе анализа повторяющихся букв, эмотиконов, пунктуации, сентимента и теггирования твиттов с учетом смысла слов	Улучшение точности алгоритмов классификации за счет исследования неоднозначности смысла слов
Ораби и др. [10]	депрессивное состояние	1145 пользователей с исследованием слов твиттов этих пользователей	Оптимизация векторного представления с учетом специфичных слов для предметной области	Векторизация на основе скипграмм и непрерывного мешка слов	Наилучший результат достигнут на основе однослойной сверточной нейронной сети со слоем глобального максимального пуллинга и оптимизацией векторного представления и составляет 86,967% (AUC-оценка)

грамм и триграмм, описывающих предметную область, и рассмотрение подходов к векторизации текстов комментариев на основе анализа биграмм и их характеристик для решения задач классификации и кластеризации комментариев, содержащих описание аффективных расстройств.

Несмотря на разработку эффективных подходов для предобработки, векторизации и классификации твиттов и текстов комментариев в социальных сетях по классам, соответствующим различным аффективным состояниям, исследования, направленные на извлечение закономерностей, описывающих причины таких состояний, остаются актуальными. Следует отметить, что

комментарии в социальных сетях существенно отличаются от твиттов, поскольку позволяют более подробно описывать мысли и чувства. В частности, людям, страдающим депрессиями, свойственна смена настроения при написании комментариев в социальных сетях [12]. Кроме того, в комментариях людей, страдающих депрессией, отмечается описание позитивного прошлого, которое сменяется описанием негативного настоящего, поэтому требуется разработка специальных методов от этапа предобработки текстов комментариев до этапа классификации, кластеризации и извлечения закономерностей из них с учетом особенностей аффективных расстройств.

3. Датасет и методология исследования

3.1. Классификация текстовых сообщений из двух классов: класс с описанием аффективных состояний и класс обычных комментариев

В исследовании использовался сбалансированный датасет из 3553 комментариев: 1857 комментариев с описанием тревожностей и 1696 обычных комментариев из социальной сети Reddit. Разметка комментариев по двум классам выполнялась вручную с привлечением двух практикующих экспертов, оказывающих помощь людям с различными типами аффективных расстройств. Рассмотренный датасет является частью датасета, описанного в работе [13] и представленного на платформе Kaggle.

В качестве базового алгоритма классификации рассматривался алгоритм случайного леса. Для повышения качества алгоритма классификации изучались различные подходы к векторизации текста:

- 1) применение мешка слов (BoW);
- 2) применение меры TF-IDF;
- 3) применение глубокой модели представления языка BERT;
- 4) применение анализа биграмм на основе точечной взаимной информации, а также числовых оценок сентимента, полученных с помощью метода VADER, реализованного в python-библиотеке vaderSentiment.

Кратко опишем методы, перечисленные выше. Модель «мешок слов» (BoW) основана на извлечении всех слов из текстов комментариев и сопоставлении им частотности их появления в комментариях. Мера TF-IDF (TF — term frequency, IDF — inverse document frequency) вычисляется как произведение отношения числа вхождений выбранного слова к общему количеству слов в комментарии и инверсии частоты, с которой некоторое слово встречается в комментариях корпуса [14]. Глубокая модель представления языка BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers) реализует архитектуру трансформер и позволяет учитывать контекст и представление токена, а также его положение внутри предложения и номер предложения в корпусе [15].

Для оценки качества классификации исследуемых подходов на сбалансированном датасете использовались показатели (1)–(4), приведенные ниже, и 5-кратная перекрестная проверка.

$$(1) \quad Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN},$$

$$(2) \quad Precision = \frac{TP}{TP + FP},$$

$$(3) \quad Recall = \frac{TP}{TP + FN},$$

$$(4) \quad F1 - score = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall},$$

где TP , TN , FP , FN — истинно положительные, истинно отрицательные, ложно положительные, ложно отрицательные значения соответственно.

3.2. Кластеризация текстовых сообщений, содержащих описания аффективных состояний

На этапе кластеризации был использован датасет из 1857 сообщений с описанием различных тревожностей. Приведем пример случайного комментария с авторской орфографией из исследуемого датасета: «Приступ длился несколько часов. Это было похоже на проблемы с кровообращением, и я запаниковал и, конечно же, снова оказался в отделении неотложной помощи. На этот раз ко мне сразу же приехал врач. Он хотел поговорить о моем тревожном состоянии. Он сказал, что может провести еще несколько тестов, но не думает, что это поможет.»

Следуя методологии для выявления математической тревожности на основе анализа комментариев MOOK, изложенной в работе [16], для выделения кластеров использовалась векторизация текстов комментариев на основе глубокой модели представления языка BERT и алгоритма кластеризации k-Means.

Рассмотрим гибридный подход, основанный на применении метода тематического моделирования LDA, метода анализа тональности VADER, точечной взаимной информации, анализа частей речи, и позволяющий выделять биграммы и триграммы для описания кластеров комментариев.

Алгоритм анализа биграмм и построение на их основе триграмм основан на следующих основных этапах:

1) извлечение M ключевых слов с наибольшей частотой из тем, определенных на основе латентного размещения Дирихле (LDA) и выделение на основе анализа частей речи существительных или глаголов. Латентное размещение Дирихле направлено на извлечение скрытых (латентных) тем из документов, причем при построении тематической модели и определении количества

тем учитывался показатель когерентности для обеспечения схожести термов в рамках одной темы;

2) извлечение ключевых биграмм кластера, у которых левый и/или правый токен является одним из M ключевых слов тем;

3) во множестве всех биграмм для ключевой биграммы извлекается левая и правая соседняя биграмма и осуществляется склеивание по общим словам для получения триграммы;

4) на основе анализа частей речи удаляются триграммы, содержащие MD (модальные глаголы), более двух наречий или прилагательных (RB, JJ) и т.п.;

5) множество целевых триграмм формируется на основе редких триграмм, имеющих негативную тональность. Редкие триграммы извлекаются на основе значений $pPMI$ согласно (5), а негативная тональность определяется с помощью метода сентиментного анализа VADER (Valence Aware Dictionary and sentiment Reasoner). Метод VADER основан на правилах и словарях, в которых словам из словаря экспертами сопоставлены оценки полярности [17].

Точечная взаимная информация (PMI) вычисляется по формуле

$$PMI(w_1, w_2, w_3) = \log_2 \left(\frac{P(w_1, w_2, w_3)}{P(w_1)P(w_2)P(w_3)} \right),$$

где $P(w_1)$, $P(w_2)$, $P(w_3)$ — вероятность появления токена (слова) w_1 , w_2 , w_3 соответственно в тексте комментария, $P(w_1, w_2, w_3)$ — вероятность появления тройки слов (w_1, w_2, w_3) — триграммы в тексте комментария.

Для выявления редких триграмм использовалась модификация $pPMI$, вычисляемая по формуле

$$(5) \quad pPMI(w_1, w_2, w_3) = \max(0, PMI(w_1, w_2, w_3)).$$

Алгоритм анализа триграмм основан на построении всех триграмм для каждого кластера и выделении редких триграмм с негативной тональностью с последующим анализом частей речи на основе шаблонов: (JJ, VB, NN), (NN(P), VBD, NN(S)), (NN, VBN, NN), (NNP, VBG, NNP), (JJ, VBG, NN), (JJ, VB + VB, NN), (NN, JJ, NN) и т.п. или центральное слово триграммы имеет тег зависимости ROOT, где JJ — прилагательное, NN(NNP, NNS) — существительное множественного или единственного числа, VBG — герундий или простое причастие, VB — глагол, VBN — причастие прошедшего времени. Например, на основе шаблона (NN|JJ, VB, NN(S)|JJ) — (существительное | прилагательное, глагол, существительное (множественное число) | прилагательное) были извлечены триграммы: (паническая, произойти, атака), (кататония, обнаружить, симптомы), (нападение, влиять, травматический) и т.п.

Для сопоставления ключевых слов триграмм каждого кластера с типами психосоциологических стрессоров использовался психолингвистический словарь LIWC [19] и построенный на его основе кастомный словарь, содержащий

различные синонимы слов «тревожность», «страх», «одиночество», а также слова, описывающие различные родственные отношения и социальные связи (для сопоставления с социологическим стрессором, связанным с построением отношений); слова, описывающие различные типы боли, части тела, учреждения здравоохранения (для сопоставления с социологическим стрессором, связанным с состоянием здоровья и здравоохранением) и т.п.

4. Результаты исследования

4.1. Классификация текстовых сообщений из двух классов: класс с описанием аффективных состояний и класс обычных комментариев

Результаты 5-кратной перекрестной проверки для оценки качества алгоритма классификации (случайный лес (RF)) в зависимости от различных подходов к векторизации текстов комментариев представлены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, наилучшая точность классификации была достигнута за счет расширения векторного пространства на основе анализа биграмм и составила 91,1%.

4.2. Кластеризация текстовых сообщений, содержащих описания аффективных состояний

Предварительный этап обработки комментариев включал удаление пунктуации, стоп-слов, токенизацию, приведение к нормальной форме. Оптимальное количество кластеров для решения задачи кластерного анализа 1857 сообщений, содержащих описание аффективных состояний, оценивалось на основе голосования различных методов определения числа кластеров (силуэтный метод, метод локтя и т.д.), реализованного в R-пакете NbClust [18], и равно 7.

В табл. 3 приведен фрагмент результатов кластерного анализа на основе BERT+k-Means с выделением биграмм и триграмм с негативным сентиментом, содержащих ключевые слова, определенные на основе тематического

Таблица 2. Оценка эффективности различных подходов к векторизации текстов комментариев

Подходы	Accuracy	Precision	Recall	F1
BoW + RF	0,696 ± 0,018	0,679 ± 0,022	0,848 ± 0,014	0,760 ± 0,013
TF-IDF + RF	0,712 ± 0,019	0,700 ± 0,014	0,837 ± 0,034	0,763 ± 0,015
BERT + RF	0,723 ± 0,018	0,736 ± 0,017	0,770 ± 0,018	0,750 ± 0,015
Биграммы (pPMI + сентимент) + RF	0,714 ± 0,016	0,725 ± 0,020	0,796 ± 0,026	0,759 ± 0,013
TF-IDF + Биграммы + RF	0,824 ± 0,012	0,832 ± 0,013	0,876 ± 0,020	0,854 ± 0,011
BERT + Биграммы + RF	0,911 ± 0,018	0,926 ± 0,019	0,934 ± 0,014	0,928 ± 0,015

Таблица 3. Пример трех выделенных кластеров и построение их описаний на основе анализа биграмм и триграмм

Кластеры	Мощность	Примеры триграмм, полученных слиянием биграмм, построенных на основе LDA, rPMI, VADER	Примеры триграмм на основе VADER и rPMI
Кластер 1	304	(паническая, происходить, атака), (стресс, не верить, личность), (кататония, обнаружить, симптомы), (класс, напугать, наркотик), (болезнь, притворяющийся, парень), (старая, вращающаяся, дверь), (заснуть, падать, поворачиваться), (выпускной, травмирующий, школа), (маленький, сжимающий, паника), (жилье, плохой, школа)	(прикрытие, вынужденный, отсутствие), (плохой, получить, место), (работы, побочная, зарплата), (работы, обслуживать, оплата), (площадь, сказать, покидать), (книги, не являться, событие), (расходы, вынудить, покрывать)
Кластер 2	289	(желудок, физически, больной), (тревожность, влиять, страх), (свадьба, хронический, тревожность), (мысль, относить, ипохондрия), (терапевт, кликнуть, игра), (мчащийся, постоянно, тревожность), (эмоциональный, чувствовать, сексуальный), (гадость, облажаться, симптомы), (гадость, облажаться, игра), (злой, чувствовать, учащенно дышащий), (тревожность, числа, драма), (инцест, начать, жестокое обращение), (боль, сердце, вдохновение), (сердце, чувствовать, общение), (сердце, отслеживание, частота), (парень, чувствовать, обманутый), (нападение, повлиять, травматический)	(злой, говорить, ревнивый), (чувство, не являться, что-нибудь)
Кластер 3	251	(продукты, бороться, явный), (клинический, ноги, депрессия), (депрессия, посттравматический стрессовый синдром, гнев), (объект, проблемы, плохое обращение), (диагностируемый, тревожность, депрессия), (наркотики, проблемы, злоупотребление), (дизета, подразумевать, ненависть), (дети, доставлять боль, нам), (жестокое обращение, инвалидность, ребенок), (квартира, проблемы, жестокое обращение)	(демоны, уничтожить, жизнь), (болезнь, битва, посттравматический стрессовый синдром), (дыхание, мысли, страх), (страхи, исказить, реальность)

моделирования с помощью LDA и ранжирования с помощью точечной взаимной информации.

Например, из триграмм кластера 1 можно выделить закономерности, описывающие панические приступы, состояние кататонии, бессоницы, тревожностей, связанных со школой, наркотиками, условиями проживания и поиском работы.

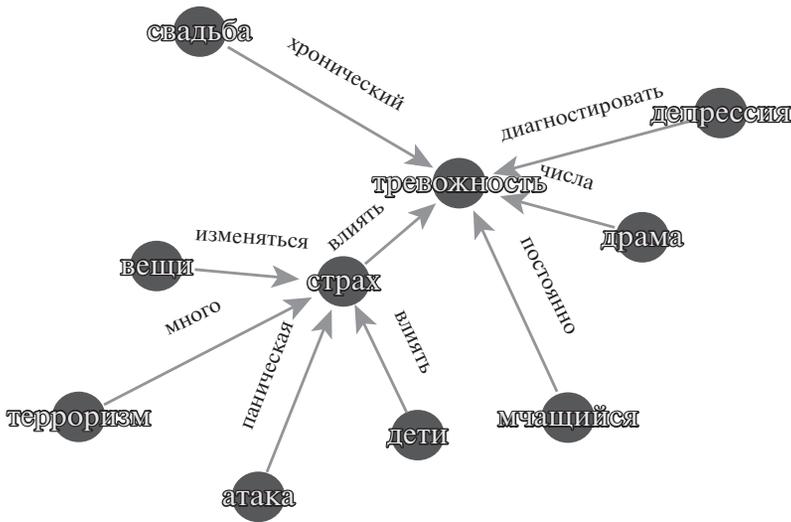
Для реализации алгоритма анализа биграмм использовались следующие python-библиотеки анализа данных: nltk, gensim, spacy, sentence-transformers.

Для каждого кластера отдельно выполнялся частотный анализ слов триграмм на основе кастомного словаря, описывающего психосоциологические стрессоры. Например, частотный анализ триграмм кластера 2 позволил определить, что большая часть комментариев рассматриваемого кластера (48% всех триграмм кластера) описывает проблемы, связанные со здоровьем, например, (сердце, отслеживание, частота), (желудок, физически, больной), (мысль, относить, ипохондрия) и т.п. Значительная часть комментариев рассматриваемого кластера (21% всех триграмм кластера) описывает проблемы, связанные с построением социальных отношений, например, (свадьба, хронический, тревожность), (злой, говорить, ревнивый), (парень, чувствовать, обманутый), (инцест, начать, жестокое обращение) и т.п.

4.3. Построение графа знаний на основе анализа биграмм и триграмм

Графы знаний хорошо зарекомендовали себя в области визуализации извлеченных закономерностей, выделении основных характеристик и демонстрации взаимосвязей между ними. Графы знаний широко применяются в области медицины, например, для представления медицинских знаний по итогам [20], для демонстрации персонализированных предложений по подбору рациона для людей, страдающих диабетом [21], однако исследования, связанные с представлением в виде графа знаний закономерностей, описывающих проблемы с ментальным здоровьем, автору неизвестны. Далее предлагается построение графа знаний для описания аффективных состояний на основе полученных триграмм.

Для каждой триграммы (w_{i-1}, w_i, w_{i+1}) строятся вершины графа с метками w_{i-1} и w_{i+1} , а также ребро с меткой w_i . Сначала выбирается целевое слово из словаря аффективных расстройств, например, «тревожность», извлекаются все триграммы, построенные на основе предложенных выше шаблонов со словом «тревожность», например, (свадьба, хронический, тревожность), (тревожность, влиять, страх), (мчащийся, постоянно, тревожность), (тревожность, числа, драма), (тревожность, диагностировать, депрессия) и т.п. Вершинами графа становится целевое слово, например, «тревожность», а также слова следующих частей речи, входящие в триграмму: существительное или любое слово с тегом ROOT (корневое слово). Ориентированным ребрам графа приписываются слова триграмм, связанные с описанием аффективного состояния и относящиеся к частям речи прилагательное, наречие, причастие,



Фрагмент графа знаний для слов «тревожность» и «страх», относящихся к проявлению аффективных состояний, составлено автором.

если слов таких частей речи нет в триграмме, то ребру приписывается оставшееся в триграмме слово. Для построения графа знаний использовалась библиотека для распознавания частей речи `spacy` и библиотека для построения графов `PyViz`. Фрагмент графа знаний, демонстрирующий построенные закономерности для слов «тревожность» и «страх», относящихся к аффективным состояниям, представлен на рисунке.

Из графа знаний, представленного на рисунке, видны тревожности, вызванные депрессией, свадьбой, драмой, а также описание тревожности, как хронической, связанной с числами, или возникающей под влиянием страха.

5. Заключение

Активное использование социальных сетей привело к накоплению огромного количества комментариев, которые оставляют пользователи. Методы обработки естественного языка совместно с алгоритмами машинного обучения позволили получить интересные результаты в области оценки эмоционального состояния, как отдельных групп пользователей социальных сетей, так и общества в целом. В последнее время активно развивается такое направление киберпсихологии как оценивание психического состояния на основе анализа комментариев в социальных сетях и влияние различного контента на физическое и ментальное здоровье человека.

В работе продемонстрирована эффективность применения биграмм для повышения качества классификации комментариев, содержащих описание аффективных расстройств, и возможности извлечения биграмм и триграмм для описания предметной области. Дальнейшие исследования автора будут

направлены на улучшение качества извлекаемых закономерностей для выявления причин различных типов психосоциологических стрессоров, приводящих к проявлению тревожных расстройств в текстах комментариев социальных медиа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Birjali M., Beni-Hssane A., Erritali M.* Machine Learning and Semantic Sentiment Analysis based Algorithms for Suicide Sentiment Prediction in Social Networks // 8th Int. Conf. Emerging Ubiquitous Systems and Pervasive Networks, Procedia Computer Science. 2017. V. 113. P. 65–72.
2. *Rabani S.T., Khan O.R., Khanday Akib Mohi U.D.* Detection of Suicidal Ideation on Twitter using Machine Learning & Ensemble Approaches // Baghdad Sci. J. 2020. V. 17. No. 4. P. 1328–1339.
3. *Coppersmith G., Dredze M., Harman C.* Quantifying Mental Health Signals in Twitter // Proc. Workshop Comput. Linguist. Clinical Psychol.: From Linguist. Signal Clinical Reality. Associat. Comput. Linguist. 2014. P. 51–60.
4. *Sarsam S.M., Al-Samarraie H.A., Ahmed I., Alnumay A., Smith A.P.* A Lexicon-based Approach to Detecting Suicide-related Text on Twitter // Biomed. Signal Proc. Control. 2021. V. 65. No. 102355.
5. *Wolk A., Chlasta K., Holas P.* Hybrid Approach to Detecting Symptoms of Depression in Social Media Entries // Twenty-Fifth Pacific Asia Conf. Information Systems. 2021. arXiv:2106.10485.
6. *Gillam L., Tariq M., Ahmad K.* Terminology and the Construction of Ontology // Terminology. 2005. V. 11. No. 1. P. 55–81.
7. *Zhang Y., Lyu H., Liu Y., Zhang X., Wang Yu., Luo J.* Monitoring Depression Trend on Twitter during the COVID-19 Pandemic: Observational Study // JMIR Format. Res. 2020. 39 p.
8. *Saifullah S., Fauziah Yu., Aribowo A.S.* Comparison of Machine Learning for Sentiment Analysis in Detecting Anxiety based on Social Media Data // arXiv:2101.06353, 2021.
9. *Pillai R.G., Thelwall M., Orasan C.* Detection of Stress and Relaxation Magnitudes for Tweets // WWW '18: Compan. Proc. Web Conf. 2018. P. 1677–1684.
10. *Orabi A.H., Buddhitha P., Orabi M.H., Inkpen D.* Deep Learning for Depression Detection of Twitter Users // Proc. Fifth Workshop Comput. Linguist. Clinical Psychol.: From Keyboard Clinic. 2018. P. 88–97.
11. *Moyeen S.I., Mabud Md.S.R., Nayem Z., Mamun Md.Al.* Sentiment Analysis of English Tweets using Bigram Collocations // EPRA Int. J. Res. Development (IJRD). 2021. V. 6. I. 9. P. 220–227.
12. *Величко А.Н., Карнов А.А.* Аналитический обзор систем автоматического определения депрессии по речи // Artificial Intellig., Knowledge and Data Engineer. 2021. No. 3. P. 497–529.
13. *Turcan E., McKeown K.* Dreddit: A Reddit Datasets for Stress Analysis in Social Media // arXiv: 1911.00133v1. 2019.
14. *Jones K.S.* A Statistical Interpretation of Term Specificity and Its Application in Retrieval // J. Document. 2004. V. 60. No. 5. P. 493–502.

15. *Devlin J., Chang M.-W., Lee K., Toutanova K.* BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding // arXiv: 1810.04805. 2018. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1810.04805>
16. *Дюличева Ю.Ю.* Учебная аналитика MOOK как инструмент анализа математической тревожности // Вопросы образования (Educat. Stud. Moscow). 2021. No. 4. С. 243–265.
17. *Hutto C., Gilbert E.* VADER: A Parsimonious Rule-Based Model for Sentiment Analysis of Social Media Text // Eight Int. AAAI Conf. Weblogs and Social Media. 2014. V. 8. No. 1. P. 216–225.
18. *Charrad M., Ghazzali N., Boiteau V., Niknafs A.* NbClust: An R Package for Determining the Relevant Number of Clusters in DataSet // J. Statist. Software. 2014. V. 61. No. 6. P. 1–36. <https://doi.org/10.18637/jss.v061.i06>
19. *Tausczik Y.R., Pennebaker J.W.* The Psychological Meaning of Words: LIWC and Computerized Text Analysis Methods // J. Lang Soc Psychol. 2010. V. 29. No. 1. P. 24–54.
20. *Cheng B., Zhang J., Liu H., Cai M., Wang Y.* Research on Medical Knowledge Graph for Stroke // J. Healthcare Engineer. 2021. V. 2021 (5531327).
21. *Haussmann S., Seneviratne O., Chen Y. et al.* FoodKG: A Semantics-Driven Knowledge Graph for Food Recommendation // Semant.-Web – ISWC. 2019. P. 146–162.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 31.01.2022

После доработки 28.05.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. В.И. ЕРОХИН, д-р физ.-мат. наук (erohin_v_i@mail.ru),
А.П. КАДОЧНИКОВ, канд. техн. наук (kado162@mail.ru),
С.В. СОТНИКОВ, канд. техн. наук (svsotnikov66@gmail.com),
(Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург)

ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЛИНЕЙНЫХ МОДЕЛЕЙ И ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ СЛОЖНОСТИ ИХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ДАННЫМ С ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЬЮ

Интервальные системы линейных алгебраических уравнений (ИСЛАУ) рассматриваются как инструмент построения линейных моделей по данным с интервальной неопределенностью. Предложены проверяемые за полиномиальное время методами вычислительной линейной алгебры достаточные условия ограниченности и выпуклости допустимой области (ДО) ИСЛАУ и ее принадлежности только одному ортанту n -мерного пространства. При этом ДО ИСЛАУ оказывается выпуклым ограниченным многогранником, целиком лежащим в некотором ортанте. Указанные свойства ДО ИСЛАУ позволяют, во-первых, находить решения соответствующих ИСЛАУ за полиномиальное время методами линейного программирования (в то время как поиск решений ИСЛАУ общего вида является NP-трудной задачей). Во-вторых, коэффициенты линейной модели, полученные с помощью решения соответствующей ИСЛАУ, обладают аналогом свойства *значимости* коэффициента линейной модели, поскольку в пределах ДО ИСЛАУ коэффициенты линейной модели не меняют свой знак. Представлены формулировка и доказательство соответствующей теоремы и иллюстративный численный пример.

Ключевые слова: интервальные системы, полиномиальная разрешимость, аналог свойства статистической значимости.

DOI: 10.31857/S0005231022120030, EDN: KRQXIP

1. Введение

Интервальные системы линейных алгебраических уравнений (как правило — переопределенные) являются естественным инструментом создания моделей и алгоритмов обработки данных с интервальной неопределенностью [1–6]. В общем случае поиск решений ИСЛАУ является NP-трудной задачей [7], что сдерживает их широкое внедрение в практику моделирования и анализа данных. В то же время, как показывает решение практических (инженерных) задач построения линейных зависимостей по экспериментальным данным с интервальной неопределенностью, допустимое множество переопределенной ИСЛАУ часто оказывается 1) выпуклым многогранником, целиком лежащим в некотором ортанте n -мерного пространства и 2) с ростом числа экспериментов стягивающимся в точку, совпадающую с истин-

ным вектором коэффициентов линейной модели. Свойство 2) является аналогом свойства *состоятельности* (см., например, [8, 9]) статистической модели, в то время как свойство 1) во-первых, гарантирует *полиномиальную трудоемкость* поиска решений ИСЛАУ (с использованием методов линейного программирования, см., например, [10]), и, во-вторых, является аналогом свойства *статистической значимости* коэффициентов (статистической) линейной модели [9]. В статье будут предложены неизвестные ранее легко проверяемые достаточные условия принадлежности допустимого множества конкретной ИСЛАУ множеству выпуклых многогранников, целиком лежащих в некотором ортанте, которые одновременно являются достаточными условиями полиномиальной сложности решения данной ИСЛАУ и аналогом свойства статистической значимости коэффициентов.

Пусть ИСЛАУ задана совокупностью условий

$$(1) \quad Ax = b, \quad \underline{A} \leq A \leq \bar{A}, \quad \underline{b} \leq b \leq \bar{b},$$

где $\underline{A}, \bar{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ — заданные матрицы; $\underline{b}, \bar{b} \in \mathbb{R}^m$ — заданные векторы, такие что $\underline{A} \leq \bar{A}$, $\underline{b} \leq \bar{b}$; $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x = (x_j) \in \mathbb{R}^n$, $b = (b_j) \in \mathbb{R}^m$ — неизвестные (подлежащие определению) матрица и векторы, $\underline{A} \neq \bar{A}$, $\underline{b} \neq \bar{b}$, $m > n$. Заметим, что в большинстве прикладных исследований в центре внимания оказывается только *объединенное множество решений* ИСЛАУ [6], определяемое как

$$\mathbf{X} = \left\{ x \mid \left(\exists A, b \mid \underline{A} \leq A \leq \bar{A}, \underline{b} \leq b \leq \bar{b}, Ax = b \right) \right\}.$$

Эквивалентное (1) представление ИСЛАУ может быть записано с помощью *средней матрицы* $A_c = (a_{ij}^c) = \frac{1}{2}(\underline{A} + \bar{A})$, *матрицы радиусов* $A_r = (a_{ij}^r) = \frac{1}{2}(\bar{A} - \underline{A})$, *среднего вектора* $b_c = (b_i^c) = \frac{1}{2}(\underline{b} + \bar{b})$ и *вектора радиусов* $b_r = (b_i^r) = \frac{1}{2}(\bar{b} - \underline{b})$:

$$Ax = b, \quad A_c - A_r \leq A \leq A_c + A_r, \quad b_c - b_r \leq b \leq b_c + b_r.$$

В терминах указанных векторов и матриц обычно формулируется важный «инструментальный» результат, характеризующий множество \mathbf{X} . Для этого рассмотрим (нелинейную) систему неравенств

$$(2) \quad |A_c x - b_c| \leq A_r |x| + b_r,$$

где $|\cdot|$ — поэлементная операция взятия абсолютной величины. Обозначим символом $\widehat{\mathbf{X}}$ множество решений системы (2).

Теорема 1 (теорема Оеттли–Прагера [11]).

$$(3) \quad \mathbf{X} \equiv \widehat{\mathbf{X}}.$$

При этом если x — решение системы неравенств (2), матрица A и вектор b могут быть построены по формулам

$$\begin{aligned} a_{ij} &= a_{ij}^c + \Delta a_{ij}, \quad b_i = b_i^c + \Delta b_i, \\ \Delta a_{ij} &= -d_i a_{ij}^r \text{sign}(x_j) / \gamma_i, \quad \Delta b_i = d_i b_i^r / \gamma_i, \\ d &= (d_i) = A_c x - b_c, \quad \gamma_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}^r |x_j| + b_i^r. \end{aligned}$$

Заметим, что при «наивном» использовании теоремы 1 система неравенств (2) (в зависимости от выбора органта, в котором ищется решение) может быть сведена к совокупности 2^n систем линейных неравенств. Это конечно не является доказательством NP-сложности поиска решений ИСЛАУ (в общем случае), но может считаться хорошей иллюстрацией указанного факта.

2. Подготовительная работа

Пусть $\hat{x} = (\hat{x}_j) = A_c^+ b_c$ — нормальное псевдорешение по методу наименьших квадратов (МНК-решение) несовместной переопределенной системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $A_c x \cong b_c$, $\Delta b_c = b_c - A_c \hat{x}$ — ее невязка с минимальной евклидовой нормой, A_c^+ — соответствующая псевдообратная матрица, и выполняются условия $A_c^1 \hat{x} \leq b_c^1$, $-A_c^2 \hat{x} \leq -b_c^2$, где c — точностью до некоторой перестановки строк A_c и элементов b_c

$$A_c = \begin{bmatrix} A_c^1 \\ A_c^2 \end{bmatrix}, \quad b_c = \begin{bmatrix} b_c^1 \\ b_c^2 \end{bmatrix}.$$

Введем обозначения:

$$\tilde{A}_c = \begin{bmatrix} A_c^1 \\ -A_c^2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{b}_c = \begin{bmatrix} b_c^1 \\ -b_c^2 \end{bmatrix}, \quad S = \text{diag}(\text{sign}(\hat{x})),$$

$$\hat{x} = (\tilde{A}_c - A_r S)^+ (\tilde{b}_c + b_r), \quad \Delta \hat{b} = (\tilde{b}_c + b_r) - (\tilde{A}_c - A_r S) \hat{x},$$

$$\tilde{\mathbf{X}} = \{x \mid (A_c - A_r S)x \leq b_c + b_r, (-A_c - A_r S)x \leq -b_c + b_r\},$$

1 — n -мерный вектор, состоящий из единиц,

0_n — нулевая матрица порядка n ,

I_n — единичная матрица порядка n ,

$\sigma_{\min}^{A_c}$ — минимальное сингулярное число матрицы A_c ,

$\sigma_{\max}^{A_r}$ — максимальное сингулярное число матрицы A_r ,

$\|\cdot\|$ — в зависимости от контекста евклидова векторная или спектральная матричная норма,

функция $\text{sign}(\cdot)$ применяется к векторному аргументу \hat{x} поэлементно, возвращая n -мерный вектор, составленный из чисел $\{-1, 0, +1\}$ в соответствии со знаками элементов \hat{x}_j .

Справедливы следующие леммы.

Лемма 1. Системы линейных неравенств

$$(4) \quad (\tilde{A}_c - A_r S)x \leq \tilde{b}_c + b_r, \quad Sx \geq 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} x \leq \begin{bmatrix} \tilde{b}_c + b_r \\ 0 \end{bmatrix}$$

и

$$(5) \quad (A_c - A_r S)x \leq b_c + b_r$$

совместны.

Доказательство. Принимая во внимание приведенные выше определения объектов \hat{x} , \tilde{A}_c , \tilde{b}_c , S и учитывая условия $A_r \geq 0$, $b_r \geq 0$, несложно убедиться, что вектор \hat{x} принадлежит множеству допустимых решений систем (4) и (5).

Лемма 2. Если система линейных неравенств

$$Ax \leq b, \quad Sx \geq 0,$$

где $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^{mn}$, совместна, и выполняется условие

$$(6) \quad \forall x | Ax \leq b, \quad Sx \geq 0 \Rightarrow Sx \geq 1\delta,$$

где S — диагональная матрица порядка n с элементами $s_j = \pm 1$ на диагонали, $\delta > 0$ — некоторый скаляр, то справедливо соотношение

$$(7) \quad \forall x | Ax \leq b \Rightarrow Sx \geq 1\delta.$$

Доказательство. Предположим противное: пусть существует вектор $y \in \mathbb{R}^n$ такой, что $Ay \leq b$, $s_j y_j \leq 0$, $s_k y_k \geq 0$, где $j \in \{1, \dots, n\}$ — некоторый индекс, $k = 1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, n$. Кроме того, пусть z — вектор, такой что $Az \leq b$, $Sz \geq 1\delta$. Рассмотрим также $x(\alpha) = \alpha y + (1 - \alpha)z$. В силу выпуклости допустимой области любой системы линейных неравенств вектор $x(\alpha)$ принадлежит допустимой области системы $Ax \leq b$ при любом $0 \leq \alpha \leq 1$. Несложно показать, что указанным ограничениям удовлетворяет параметр $\tilde{\alpha}$ такой, что $x_j(\tilde{\alpha}) = 0$. При этом выполняются условия $Ax(\tilde{\alpha}) \leq b$, $Sx(\tilde{\alpha}) \geq 0$. Следовательно, в силу (6), $Sx(\tilde{\alpha}) \geq 1\delta$, что противоречит условию $x_j(\tilde{\alpha}) = 0$.

Лемма 3. Если система неравенств $Ax \leq b$ совместна и выполняется условие (7), то для любой совместной системы линейных неравенств вида $Ax \leq b$, $Cx \leq d$, где C и d — произвольные матрица и вектор с согласованными между собой и вектором x размерностями, справедливо следствие

$$\forall x | Ax \leq b, \quad Cx \leq d \Rightarrow Sx \geq 1\delta.$$

Доказательство. Утверждение леммы непосредственно вытекает из леммы Минковского–Фаркаша о следствиях [12, Теорема 4.7].

3. Основной результат

Теорема 2. Пусть выполняются условия

$$(8) \quad \text{rank } A_c = n, \quad \sigma_{\min}^{A_c} > \sigma_{\max}^{A_r},$$

$$(9) \quad A_r S \hat{x} \leq b_r,$$

$$(10) \quad \min_{j=1, \dots, n} |\hat{x}_j| > \gamma > 0,$$

где

$$\gamma = \frac{1}{\sigma_{\min}^{A_c} - \sigma_{\max}^{A_r}} \left(\sigma_{\max}^{A_r} \left(\|\hat{x}\| + \frac{\|\Delta b_c\|}{\sigma_{\min}^{A_c}} \right) + \|b_r\| \right),$$

$$(11) \quad \Delta \hat{b} > 0,$$

$$(12) \quad \|\Delta \hat{b}\|^2 \max_{i,j} q_{ij} < 1,$$

где q_{ij} — элемент матрицы

$$(13) \quad Q = (q_{ij}) = \text{diag}(S\hat{x})^{-1} (\tilde{A}_c - A_r S)^+ \text{diag}(\Delta \hat{b})^{-1}.$$

Тогда

1. Допустимые области систем линейных неравенств (4) и (5) не пусты и являются ограниченными выпуклыми многогранниками.

2. Существует такое число $\delta > 0$, что справедливо условие

$$(14) \quad \forall x \left| (\tilde{A}_c - A_r S)x \leq \tilde{b}_c + b_r \Rightarrow Sx \geq 1\delta. \right.$$

3. Все 2^n систем линейных неравенств

$$(15) \quad (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S})x \leq \tilde{b}_c + b_r,$$

где \tilde{S} — диагональная матрица порядка n с элементами ± 1 на диагонали, совместны. При этом система линейных неравенств $Sx \geq 1\delta$ является следствием любой из них.

4. Множество \mathbf{X} совпадает с множеством $\tilde{\mathbf{X}}$ и, в случае непустоты, представляет собой выпуклый ограниченный многогранник, лежащий строго внутри ортанта, определяемого знаками диагональных элементов матрицы S или, что эквивалентно, знаками элементов вектора \hat{x} МНК-решения СЛАУ $A_c x \cong b_c$.

Доказательство теоремы 2.

1. В силу леммы 1 системы линейных неравенств (4) и (5) совместны (соответствующие допустимые области не пусты).

В силу условия (10), в формулировке которого γ — это верхняя оценка $\|\Delta x\| = \|\hat{x} - \bar{x}\|$ — погрешности МНК-решения возмущенной СЛАУ $(\tilde{A}_c - A_r S)(\hat{x} + \Delta x) \cong \tilde{b}_c + b_r$ [13, Теорема 9.12], выполняются условия $S\hat{x} > 0$, $S\bar{x} > 0$. В силу последнего условия и предположения (11) справедливо условие $S\hat{x}\Delta\hat{b}^\top > 0$. Построим две $(n \times (m + n))$ -матрицы следующим образом:

$$P = \begin{bmatrix} P_1 & P_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(\tilde{A}_c - A_r S)^+ + \alpha S\hat{x}\Delta\hat{b}^\top & 0_n \end{bmatrix},$$

$$Q = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\tilde{A}_c - A_r S)^+ + \beta S\bar{x}\Delta\hat{b}^\top & 0_n \end{bmatrix},$$

где $\alpha, \beta > 0$ — некоторые скалярные параметры. Выберем значения указанных параметров таким образом, чтобы выполнялись условия

$$(16) \quad P, Q \geq 0.$$

Поскольку S — ортогональная матрица, в силу свойств спектральной матричной нормы (см., например [14]) выполняются условия $\|A_r S\| = \|A_r\| = \sigma_{\max}^{A_r}$. Учитывая этот факт, а также условия (8), получаем $\text{rank}(\tilde{A}_c - A_r S) = n$ (см., например [13, Теорема 9.12]), и поэтому в силу известных свойств псевдообратных матриц полного столбцевого ранга и невязок псевдорешений [13] имеют место равенства

$$(17) \quad (\tilde{A}_c - A_r S)^+(\tilde{A}_c - A_r S) = I_n, \quad \Delta\hat{b}^\top(\tilde{A}_c - A_r S) = 0.$$

Следовательно, выполняются условия

$$(18) \quad P \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} = P_1(\tilde{A}_c - A_r S) = -I_n,$$

$$Q \begin{bmatrix} \tilde{A}_c - A_r S \\ -S \end{bmatrix} = Q_1(\tilde{A}_c - A_r S) = I_n.$$

В то же время

$$(19) \quad (P + Q) \begin{bmatrix} \tilde{b}_c + b_r \\ 0 \end{bmatrix} = (P_1 + Q_1)(\tilde{b}_c + b_r) = (\alpha + \beta) \|\Delta\hat{b}\|^2 S\bar{x} > 0.$$

Теперь остается заметить, что условия (16)–(19) являются необходимыми и достаточными условиями *ограниченности* не пустых допустимых областей систем линейных неравенств (4) и (5) [12, Задача 4.117], которые в этом случае оказываются не просто выпуклыми многогранными множествами, а выпуклыми ограниченными многогранниками [12].

2. Построим $(n \times m)$ -матрицу G по формуле

$$(20) \quad G = -S(\tilde{A}_c - A_r S)^+ + \chi S \widehat{x} \Delta \widehat{b}^\top.$$

В силу (12) скалярный параметр χ возможно выбрать таким образом, чтобы он удовлетворял условиям

$$(21) \quad \max \left\{ \max_{i,j} q_{ij}, 0 \right\} \leq \chi < \frac{1}{\|\Delta \widehat{b}\|^2}.$$

Покажем, что выполняется условие $G \geq 0$. В силу допущения (11) и установленного выше условия $S \widehat{x} > 0$ элементы матрицы $H = (h_{ij}) = \text{diag}(S \widehat{x})^{-1} G \text{diag}(\Delta \widehat{b})^{-1}$ имеют те же знаки, что и элементы матрицы G . Но в силу (13) и (20) $h_{ij} = -q_{ij} + \chi$, откуда в силу (21) $H, G \geq 0$.

Заметим теперь, что в силу (17) и (21)

$$G(\tilde{A}_c - A_r S) = -S, \quad G(\tilde{b}_c + b_r) = S \widehat{x}(-1 + \chi \|\Delta \widehat{b}\|^2) < 0,$$

откуда в силу теоремы Минковского–Фаркаша о следствиях [12, Теорема 4.7] найдется такое число $\delta > 0$, что будет выполнено условие (14).

3. Заметим, что если выполняется условие (9), то система линейных неравенств

$$(22) \quad (\tilde{A}_c + A_r S)x \leq \tilde{b}_c + b_r, \quad Sx \geq 0$$

совместна. Это действительно так, поскольку вектор \hat{x} принадлежит множеству допустимых решений системы (22). Теперь заметим, что система линейных неравенств (4) совместна в силу леммы 1. Кроме того,

$$(23) \quad \forall x | Sx \geq 0, \quad \forall \tilde{S} \neq S \Rightarrow -A_r Sx \leq -A_r \tilde{S}x \leq A_r Sx.$$

С учетом совместности систем линейных неравенств (4) и (22), соотношения (23), лемм 2, 3 и условия (14), приведенные ниже системы, *совместны*, справедлива цепочка следствий (в которой каждая последующая система линейных неравенств является следствием предыдущей):

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{A}_c + A_r S)x \leq \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geq 0 \end{array} \right. &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S})x \leq \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geq 0 \end{array} \right. \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{A}_c - A_r S)x \leq \tilde{b}_c + b_r \\ Sx \geq 0 \end{array} \right. \Rightarrow Sx \geq 1\delta, \end{aligned}$$

и, окончательно, все системы линейных неравенств вида (15) совместны и система $Sx \geq 1\delta$ является следствием любой из них.

4. Заметим, что

$$(24) \quad \forall x \Rightarrow |A_c x - b_c| = \left| \tilde{A}_c x - \tilde{b}_c \right|.$$

В силу (24) систему неравенств (2) можно записать в виде

$$|A_c x - b_c| \leq A_r |x| + b_r \Leftrightarrow \begin{cases} A_c x - b_c \leq A_r |x| + b_r \\ b_c - A_c x \leq A_r |x| + b_r. \end{cases}$$

В свою очередь,

$$\begin{aligned} A_c x - b_c \leq A_r |x| + b_r &\Leftrightarrow (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leq \tilde{b}_c + b_r, \\ A_c x - b_c \leq A_r |x| + b_r &\Leftrightarrow (-\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leq -\tilde{b}_c + b_r, \\ &j = 1, \dots, 2^n, \end{aligned}$$

где \tilde{S}_j — одна из 2^n диагональных матриц порядка n с элементами ± 1 на диагонали.

Но в силу леммы 3 справедливо следствие

$$\forall x \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leq \tilde{b}_c + b_r \\ (-\tilde{A}_c - A_r \tilde{S}_j)x \leq -\tilde{b}_c + b_r \\ j = 1, \dots, 2^n \end{array} \Rightarrow Sx \geq 1\delta.$$

Объединяя приведенные выше выкладки, получаем

$$(25) \quad \forall x \left| |A_c x - b_c| \leq A_r |x| + b_r \Rightarrow Sx \geq 1\delta.$$

В свою очередь, в силу (25) и (3),

$$\begin{aligned} |A_c x - b_c| \leq A_r |x| + b_r &\Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \begin{cases} (A_c - A_r S)x \leq b_c + b_r \\ (-A_c - A_r S)x \leq -b_c + b_r \end{cases} &\Leftrightarrow \tilde{\mathbf{X}} \equiv \widehat{\mathbf{X}} \equiv \mathbf{X}. \end{aligned}$$

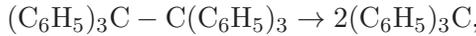
Но, как было показано в п. 1 доказательства, допустимая область системы неравенств $(\tilde{A}_c - A_r S)x \leq (\tilde{b}_c + b_r)$ не пуста и представляет собой выпуклый ограниченный многогранник. Следовательно, в силу всего вышесказанного, если допустимая область исследуемой ИСЛАУ не пуста, она является выпуклым ограниченным многогранником, лежащим строго внутри ортанта, определяемого знаками диагональных элементов матрицы S , или, что эквивалентно, знаками элементов вектора \hat{x} МНК-решения СЛАУ $A_c x \cong b_c$.

4. Численный пример

В качестве численного примера рассмотрим обратную задачу химической кинетики для необратимой реакции 1-го порядка, которая заключается в определении по экспериментальным данным двух неизвестных параметров: c_0 (начальной концентрации вещества) и k (константы скорости реакции) в кинетической модели вида

$$(26) \quad c(t) = c_0 \exp(-kt),$$

где $c(t)$ — концентрация вещества в момент времени t . Экспериментальные данные, которые будут подвергнуты обработке, взяты из [15] и касаются необратимой реакции распада молекул гексафенилэтана на две молекулы свободного радикала трифенилметила:



протекающей при 0 °С в смеси 95% толуола и 5% анилина. Соответствующие числовые значения представлены в таблице.

Экспериментальная кинетика разложения гексафенилэтана

$t^{\text{эксп}}$, мин	0	0,50	1,05	2,20	3,65	5,5	7,85	9,45	14,75
$c^{\text{эксп}}(t)$, моль/л	0,1000	0,0934	0,0867	0,0733	0,0600	0,0465	0,0334	0,0265	0,0134

Следуя логике работы [2], будем считать, что исследуемые экспериментальные данные обладают интервальной неопределенностью следующего вида:

$$t_1 = 0, \quad t_i = t_i^{\text{эксп}} \pm \varepsilon_t, \quad i = 2, 3, \dots, 9, \quad \varepsilon_t = 0,005,$$

$$c(t_i) = c^{\text{эксп}}(t_i) \pm \varepsilon_c, \quad i = 1, 2, \dots, 9, \quad \varepsilon_c = 0,0005.$$

Переход от (26) к линеаризованной модели $\ln(c(t)) = \ln(c_0) - kt$ позволяет сформировать ИСЛАУ с 9 интервальными уравнениями и 2 неизвестными, матрицы коэффициентов A_c , A_r и векторы правой части b_c , b_r которой имеют следующий вид:

$$A_c = \begin{pmatrix} 1 & t_1^{\text{эксп}} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_9^{\text{эксп}} \end{pmatrix}, \quad A_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_t \\ \vdots & \vdots \\ 0 & \varepsilon_t \end{pmatrix}, \quad b_c = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_9 \end{pmatrix}, \quad b_r = \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \vdots \\ \zeta_9 \end{pmatrix},$$

где

$$\xi_i = \frac{\ln(c(t_i^{\text{эксп}}) - \varepsilon_c) + \ln(c(t_i^{\text{эксп}}) + \varepsilon_c)}{2},$$

$$\zeta_i = \frac{\ln(c(t_i^{\text{эксп}}) + \varepsilon_c) - \ln(c(t_i^{\text{эксп}}) - \varepsilon_c)}{2}.$$

Вычисления, выполненные в среде Mathcad 15.0, дают следующие результаты:

$$\hat{x} \approx \begin{pmatrix} -2,3088695 \\ -0,1374258 \end{pmatrix}, \quad \tilde{x} \approx \begin{pmatrix} -2,3146126 \\ -0,1364464 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\tilde{A}_c = \begin{pmatrix} 1 & 0,00 \\ 1 & 0,50 \\ 1 & 1,05 \\ -1 & -2,20 \\ -1 & -3,65 \\ -1 & -5,50 \\ -1 & -7,85 \\ -1 & -9,45 \\ 1 & 14,75 \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_c \approx \begin{pmatrix} -2,302598 \\ -2,370878 \\ -2,445318 \\ 2,613218 \\ 2,813445 \\ 3,068360 \\ 3,399311 \\ 3,630789 \\ -4,313197 \end{pmatrix}, \quad b_r \approx \begin{pmatrix} 0,005000 \\ 0,005353 \\ 0,005767 \\ 0,006821 \\ 0,008334 \\ 0,010753 \\ 0,014971 \\ 0,018870 \\ 0,037331 \end{pmatrix},$$

$$\Delta \hat{b} \approx \begin{pmatrix} 0,017015 \\ 0,017993 \\ 0,019013 \\ 0,005927 \\ 0,009819 \\ 0,014728 \\ 0,029248 \\ 0,046310 \\ 0,052012 \end{pmatrix}, \quad A_r S \hat{x} \approx \begin{pmatrix} 0,000000 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \\ 0,000687 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_{\min}^{A_c} \approx 2,030051 > \sigma_{\max}^{A_r} \approx 0,014142, \quad \text{rank } A_c = \text{rank } (\tilde{A}_c - A_r S) = 2,$$

$$\gamma \approx 0,040104, \quad \|\Delta \hat{b}\|_{\max}^2 \approx 0,125540.$$

Представленные численные значения свидетельствуют о выполнении условий (8)–(12) теоремы 2. Справедливость основных утверждений теоремы (вид и взаимное расположение допустимых областей соответствующих систем неравенств) продемонстрирована графически на приведенном рисунке.

5. Заключение

В статье предпринята попытка сблизить теорию и методы интервальных систем линейных алгебраических уравнений с инженерной практикой построения линейных моделей по экспериментальным данным с интервальной неопределенностью. Полученные (в форме соответствующих достаточных условий) результаты не противоречат интуитивно понятному требованию к исходным данным, которое неформально можно сформулировать как требование относительной «малости» интервальных ошибок по сравнению

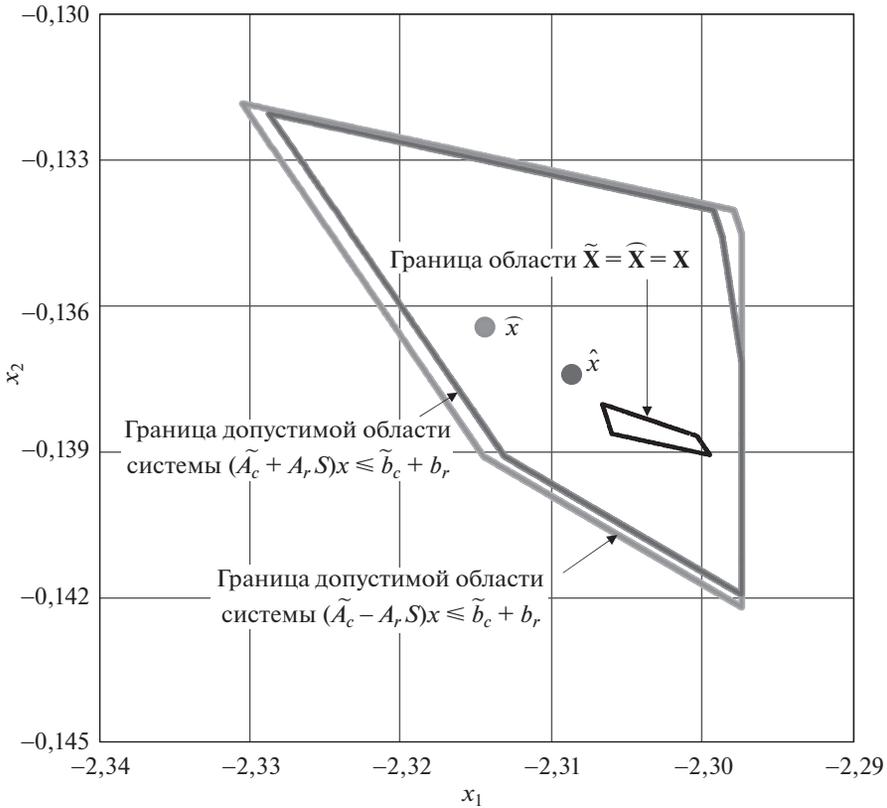


Иллюстрация выполнения условий теоремы 2.

с коэффициентами матрицы A_c и вектора b_c «центральной» СЛАУ в сочетании с требованием не «не слишком высокого» числа обусловленности матрицы A_c .

Некоторые важные вопросы остались за рамками данной работы. Например, обсуждение численных алгоритмов нахождения МНК-решений и их невязок, определения ранга матриц, вычисления сингулярных чисел матриц. Этот вопрос может быть предметом отдельного исследования, и в то же время ему посвящена обширная литература. В контексте данной статьи отметим только, что построение МНК-решений и соответствующих невязок может быть осуществлено эффективными, полиномиальными по трудоемкости конечношаговыми или итерационными методами, а сингулярные числа могут быть вычислены с помощью эффективных итерационных алгоритмов, обладающих полиномиальной трудоемкостью. Обзор соответствующих алгоритмов с оценкой их трудоемкости можно найти, например, в монографии [16].

То же самое можно сказать о проблеме выбора эффективного численного метода для поиска решений системы линейных неравенств, к которой свелась проблема поиска решения ИСЛАУ. Численные методы линейного программи-

рования продолжают интенсивно развиваться, поэтому затронутый вопрос может быть предметом дальнейшего исследования.

В качестве еще одного направления дальнейшего исследования, по-видимому, можно указать на поиск достаточных условий «значимости» коэффициентов интервальных линейных моделей, основанных не на МНК-решении «центральной» СЛАУ, а ее псевдорешениях в других нормах (ℓ_1 , ℓ_∞).

Вполне возможно, что проведенная в статье аналогия между свойством статистической значимости некоторого отдельно взятого коэффициента статистической модели и свойством сохранения знака (внутри соответствующей допустимой области) некоторого отдельно взятого коэффициента модели с интервальной неопределенностью данных может оказаться дискуссионной, что хорошо осознается авторами. Возможно, на этот вопрос ответит практика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вощинин А.П., Боков А.Ф., Сотиров Г.Р.* Метод анализа данных при интервальной нестатистической ошибке // Завод. лаб. 1990. Т. 56. № 7. С. 76–81.
2. *Белов В.М., Суханов В.А., Лагуткина Е.В.* Интервальный подход при решении задач кинетики простых химических реакций // Вычисл. технологии. 1997. Т. 2. № 1. С. 10–18.
3. *Поляк Б.Т., Назин С.А.* Оценивание параметров в линейных многомерных системах с интервальной неопределенностью // Проблемы управления и информатики. 2006. № 1. С. 103–116.
4. *Zhilin S.I.* Simple method for outlier detection in fitting experimental data under interval error // Chemometrics and Intellectual Laboratory Systems. 2007. V. 88. No. 1. P. 60–68.
5. *Мадияров М.Н., Оскорбин Н.М., Суханов С.И.* Примеры интервального анализа данных в задачах моделирования процессов // Изв. Алт. гос. ун-та. 2018. № 1(99). С. 113–118.
6. *Шарый С.П.* Задача восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределенностью // Завод. лаб. Диагностика материалов. 2020. Т. 86. № 1. С. 62–74.
7. *Фидлер М., Недома Й., Рамик Я., Рон И., Циммерман К.* Задачи линейной оптимизации с неточными данными. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». Институт компьютерных исследований, 2008.
8. *Ибрагимов И.А., Хасьминский Р.З.* Асимптотическая теория оценивания. М.: Наука, 1979.
9. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980.
10. *Схрейвер А.* Теория линейного и целочисленного программирования: В 2-х т. Т. 1. М.: Мир, 1991.
11. *Oettli W., Prager W.* Compatibility of Approximate Solution of Linear Equations with Given Error Bounds for Coefficients and Right-Hand Sides // Numerische Mathematik. 1964. No. 6. P. 405–409.
12. *Ашманов С.А., Тимохов А.В.* Теория оптимизации в задачах и упражнениях. СПб.: Изд-во «Лань», 2012.

13. Лоусон Ч., Хенсон Р. Численное решение задач метода наименьших квадратов. М.: Наука, 1986.
14. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. М.: Мир, 1989.
15. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.
16. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 31.01.2022

После доработки 21.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. Н.А. СКАЧКОВ (nikolaj-skachkov@yandex.ru)
К.В. ВОРОНЦОВ, д-р физ-мат. наук (vokov@forecsys.ru)
(Федеральный исследовательский центр
“Информатика и управление” РАН, Москва)

УЛУЧШЕНИЕ КАЧЕСТВА МАШИННОГО ПЕРЕВОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБРАТНОЙ МОДЕЛИ

Машинный перевод — это задача обработки текстов естественного языка, ставящая своей целью перевод входного текста с одного языка на другой язык в автоматическом режиме. Известные на данный момент модели машинного перевода показывают достаточно высокое качество перевода между крупными языками, однако для более мелких языковых направлений, представленных меньшим количеством данных, задача все еще не решена. Для борьбы с различными ошибками автоматических систем перевода применяются разные методы. В данной работе рассматриваются подходы, использующие переводные модели обратных языковых направлений и улучшающие согласованность между переводами одного текста с помощью прямых и обратных им моделей перевода. В работе представлено общее теоретическое обоснование для таких методов с точки зрения решения задачи максимизации правдоподобия, а также предложен способ стабильного обучения современных моделей с использованием циклических переводов.

Ключевые слова: машинный перевод, нейронная сеть, стохастический градиентный спуск, вероятностное моделирование, максимум правдоподобия, выбор по значимости, циклические переводы, дообучение модели

DOI: 10.31857/S0005231022120042, EDN: KRVZJE

1. Вступление

Задача машинного перевода является важной и сложной задачей анализа и генерации текстов естественного языка. Ручной перевод текстов является дорогостоящим и трудоемким процессом, так как требует привлечения специалистов с глубоким знанием нескольких языков.

В основе современных моделей автоматического перевода лежат нейросетевые модели, обученные на большом количестве пар: предложение и его перевод [1]. На основе большого объема данных модели перевода выучивают межъязыковые связи и языковые модели, которые необходимы для генерации качественного перевода. При этом в самом процессе обучения переводная модель учится пословно воспроизводить поданные ей переводы.

Одним из важных аспектов при оценке качества автоматического перевода является согласованность или смысловая схожесть текстов, полученных с помощью перевода между разными языками одного и того же текста. Например, если при переводе какого-то текста с английского на русский и обратно

на английский получить результат, значительно отличающийся от исходного текста, это свидетельствует о низком качестве моделей перевода между данными языками.

Для избежания описанных проблем в переводах существует метод, напрямую улучшающий согласованность переводов прямой и обратной моделей перевода [2]. Для этого предлагается учить модель генерировать такие переводы, чтобы перевод обратной модели больше совпадал с исходным текстом. При этом авторы обучают такую модель с помощью алгоритма REINFORCE с эмпирически выбранной функцией награды. Оказалось, что такой метод увеличивает не только согласованность, но и качество перевода в целом за счет предоставления прямой модели во время обучения информации, которую несет обратная модель.

Однако применение описанного метода сопряжено с некоторыми трудностями. Одна из них заключается в необходимости одновременно хранить градиенты для прямой и обратной моделей на каждой итерации обучения. В изначальном методе предполагается использовать рекуррентные модели перевода [3], однако для современных архитектур такие требования делают метод трудноприменимым на практике, так как гиперпараметры прямой модели для наиболее эффективного обучения выбираются так, чтобы использовать всю возможную память вычислительных устройств [4]. Другая проблема описанного подхода заключается в том, что на первых итерациях обучения градиент для прямой модели обладает высокой дисперсией. По этой причине в [2] для стабилизации обучения оценивается значимость обратного перевода с помощью дополнительных языковых моделей, что требует еще больше вычислительных ресурсов и времени.

В данной работе представлен теоретически обоснованный метод обучения с использованием обратной модели, выведенный из правдоподобия циклических переводов. Полученная формула функции потерь отличается от формулы в [2]. Кроме того, в ней не используются эвристики для стабилизации обучения с помощью языковых моделей. Проблема высокой дисперсии градиентов, даваемых предложенной функцией потерь решается с помощью дообучения уже предобученной модели перевода. Данное решение экономит вычислительные ресурсы, так как нет необходимости хранить в памяти дополнительные параметры языковых моделей и статистики оптимизатора для обратной модели, а сам процесс дообучения сходится существенно быстрее, чем обучение с нуля. Все это позволяет обучать прямую модель совместно с обратной, используя современные архитектуры моделей перевода, не уменьшая их в размере.

Также в работе показано, каким образом обучение с обратной моделью сказывается на качестве машинного перевода, а также на согласованности переводов текстов между прямой и обратной ей моделями. Эксперименты проводятся на русско-казахском и англо-финском языковых направлениях.

2. Описание подхода

В данном разделе приведены вероятностные модели, лежащие в основе построения алгоритмов автоматического перевода, а также предлагается обобщение использования обратных моделей через сведение к задаче моделирования правдоподобия циклических переводов.

2.1. Задача машинного перевода

Опишем для начала общую постановку задачи машинного перевода. Пусть дано множество пар текстов на двух языках $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$. Обозначим, что тексты x_i принадлежат языку входа (ЯВ), а тексты y_i принадлежат целевому языку (ЦЯ). Для обучения модели перевода необходимо максимизировать правдоподобие переводных текстов, при условии входных текстов. Записывая данное требование в виде максимизации логарифма правдоподобия, получим:

$$\sum_{i=1}^N \log P_{\theta}(y_i|x_i) \longrightarrow \max_{\theta},$$

где θ — параметры переводной модели.

Для модели перевода необходимо, чтобы модель не только могла давать оценку вероятности переводного текста, но и давала возможность получить сам перевод. Частым решением является использование авторегрессионных моделей [1]. В данном подходе генерация перевода происходит итеративно слева-направо. При этом оценка вероятности перевода с этим требованием записывается так:

$$(1) \quad \log P_{\theta}(y|x) = \sum_{t=1}^{|y|} \log P_{\theta}(y^t|y^{<t}, x),$$

где y^t — это t -е слово перевода, а $y^{<t}$ — это префикс перевода для t -го слова.

Авторегрессионность является достаточно сильным ограничением, однако благодаря итеративной генерации можно избежать полного перебора гипотез перевода в поисках гипотезы с максимальной вероятностью. Далее в данной работе все модели перевода будут предполагаться авторегрессионными.

2.2. Использование обратной модели

В данной работе как и в оригинальном методе будем рассматривать рост согласованности моделей как увеличения совпадения циклического перевода через целевой язык с оригинальным текстом. Для этого рассмотрим конструкцию порождения циклического перевода ЯВ \rightarrow ЦЯ \rightarrow ЯВ. В нем текст на языке входа прямой моделью переводится на целевой язык и, далее, переводится обратной моделью снова на язык входа. Для построения вероятностной модели нужно записать необходимость совпадения полученного циклического перевода с исходным текстом.

Для этого введем понятие вероятности циклического перевода следующим образом:

$$(2) \quad P_{\text{cycle}}(x'|x) = \mathbb{E}_{y \sim P_{\Theta}(y|x)} P'(x'|y),$$

где $P_{\Theta}(y|x)$ — параметризованная прямая модель перевода, а $P'(x|y)$ — обратная модель. Такая вероятность показывает то, какова в среднем по всем прямым переводам модели вероятность получения циклического перевода x' из текста x .

Несмотря на полезность введенного понятия для построения вероятностной модели, вычислить его невозможно, так как подсчет среднего по всем возможным переводам приводит к суммированию по бесконечному множеству текстов на целевом языке. Для получения несмещенной оценки этого выражения, которое может понадобиться для оценки функции потерь на тестовой выборке, нужно воспользоваться процедурой выбора по значимости.

Введя вероятность циклического перевода $P_{\text{cycle}}(x'|x)$, можно перейти к записи оптимизируемого функционала, отражающего необходимость совпадения циклического перевода с исходным текстом

$$\log P_{\text{cycle}}(x|x) = \log \mathbb{E}_{y \sim P_{\Theta}(y|x)} P'(x|y) \longrightarrow \max_{\Theta}.$$

Для обучения нейросетевых моделей методом градиентного спуска необходимо получить значение градиента данной функции потерь. При этом можно заметить, что после произведенного логарифмирования выражение более невозможно оценить несмещенно с помощью процедуры выбора по значимости. По этой причине перейдем к максимизации нижней оценки функции потерь, воспользовавшись при этом неравенством Йенсена для вогнутых функций. Функция логарифма является вогнутой, а вероятностное распределение образует выпуклую комбинацию, следовательно

$$\log \mathbb{E}_{y \sim P_{\Theta}(y|x)} P'(x|y) \geq \mathbb{E}_{y \sim P_{\Theta}(y|x)} \log P'(x|y) =: L(x).$$

Так как был осуществлен переход к нижней оценке, теперь необходимо получить значения градиентов именно для нее. Поэтому представим математическое ожидание в виде интеграла, и внесем градиент, являющийся линейным оператором, внутрь

$$\nabla_{\Theta} L(x) = \nabla_{\Theta} \int P_{\Theta}(y|x) \log P'(x|y) dy = \int \log P'(x|y) \nabla_{\Theta} P_{\Theta}(y|x) dy.$$

Чтобы избежать суммирования по бесконечному множеству, при подсчете градиента также нужно воспользоваться процедурой выбора по значимости. Для этого данное представление градиента нижней оценки функции потерь представим в виде математического ожидания по некоторому распределению, воспользовавшись следующим преобразованием:

$$\frac{\partial \log f(x)}{\partial x} = \frac{1}{f(x)} \frac{\partial f(x)}{\partial x}.$$

Применив данное преобразование, получим следующий вид градиента нижней оценки функции потерь:

$$\begin{aligned}\nabla_{\Theta}L(x) &= \int \log P'(x|y)P_{\Theta}(y|x)\nabla_{\Theta} \log P_{\Theta}(y|x)dy = \\ &= \mathbb{E}_{y\sim P_{\Theta}(y|x)} \log P'(x|y)\nabla_{\Theta} \log P_{\Theta}(y|x).\end{aligned}$$

Теперь есть возможность оценить данное выражение значением на одном примере с помощью процедуры выбора по значимости

$$(3) \quad \nabla_{\Theta}L(x) \approx \log P'(x|y)\nabla_{\Theta} \log P_{\Theta}(y|x), \quad y \sim P_{\Theta}(y|x).$$

Если рассмотреть $\mathcal{L}(x, y)$ — функцию потерь прямой модели при обучении без циклических переводов (1), то полученная оценка градиента (3) может быть представлена как градиент при обучении без циклических переводов, умноженный на некоторый коэффициент

$$\begin{aligned}\nabla_{\Theta}\mathcal{L}(x, y) &= \nabla_{\Theta} \log P_{\Theta}(y|x) \\ \nabla_{\Theta}L(x) &\approx w(x, y)\nabla_{\Theta} \log P_{\Theta}(y|x), \quad y \sim P_{\Theta}(y|x), \quad w = \log P'(x|y).\end{aligned}$$

Представление градиента функции потерь в виде градиента прямой модели, умноженной на коэффициент, позволяет дать интерпретацию полученным формулам: чем больше вероятность получения исходного текста при обратном переводе из y , тем более прямая модель будет стремиться переводить x как y в сравнении с обучением без циклической функции потерь (1).

При полученном визуальном сходстве градиентов функций потерь прямой модели перевода (1) и модели с циклическими переводами (2) в последней вместо реальных текстов используются сгенерированные с помощью прямой модели переводы.

Можно заметить, что представленное выражение градиента (3) имеет сходство с выражениями градиентов из оригинальной работы [2], при том что ее авторы получили градиенты для обучения, используя эвристики. В данной же работе предложена исходная вероятностная модель, из которой получены градиенты для оптимизации. Данная вероятностная модель обобщает использование обратной модели перевода и дает возможность для развития данного метода в будущем.

3. Используемые методы

3.1. Архитектура модели

В основе современных моделей перевода лежат нейронные сети архитектуры Transformer [5]. Архитектура Transformer, в свою очередь, состоит из кодировщика и декодировщика, каждый из которых состоит из последовательных применений блоков одинаковой структуры. Каждый блок обладает своим собственным набором параметров и применяется к каждому векторному представлению слова, полученного от предыдущего блока. В процессе работы кодировщика для каждого входного слова подается информация о

каждом слове из входного предложения. Эта информация помогает обогатить векторное представление слова с помощью контекстной информации. В процессе работы декодировщика подается информация только о словах префикса, предшествующего обрабатываемому слову. Это позволяет использовать декодировщик для авторегрессионной генерации (1).

Обучение модели заключается в минимизации функций потерь (1) и (2) методом Adam [6]. В основе данного метода лежит процедура стохастического градиентного спуска, при котором вычисляется градиент функции потерь по оптимизируемым параметрам и совершается спуск в направлении, противоположном вычисленному градиенту.

В данной работе для обучения модели перевода использовалась именно архитектура Transformer с оптимизатором Adam. Подробнее с особенностями поставленных экспериментов можно познакомиться в секции с экспериментами.

3.2. Оценка качества перевода

Для оценки качества переводов в экспериментах будет использоваться метрика BLEU [7], имеющая достаточно хорошую корреляцию с оценками людей. Метрика рассчитывается на основе пересечения n -грамм в автоматическом и эталонном переводах одного предложения. Для каждой n -граммы длины n рассчитывается доля P_n — среднее по всем предложениям в тестовом наборе отношения частоты n -граммы в кандидатах к частоте в эталонных переводах. При этом частота в кандидате ограничена значением в эталоне, чтобы отношение частот было ограничено сверху единицей:

$$P_n = \frac{\sum_{n\text{-gram} \in C} \text{Count}_{\text{clip}}(n\text{-gram})}{\sum_{n\text{-gram}' \in C'} \text{Count}(n\text{-gram}')},$$

где C — множество предложений-переводов оцениваемой модели, C' — множество эталонных переводов тестового корпуса.

Далее BLEU рассчитывается как геометрическое среднее, умноженное на константу brevity penalty (BP)

$$BP = \min(e^{1-\frac{r}{c}}, 1),$$

$$BLEU = BP \sum_{n=1}^4 \frac{1}{n} \log P_n,$$

где r — суммарная длина эталонных переводов тестового корпуса; c — суммарная длина переводов модели. Умножение на константу BP предлагается авторами метрики для поощрения более коротких переводов системы, так как более длинные тексты в среднем содержат больше случайных пересечений по n -граммам с эталонными текстами.

Метрика BLEU имеет хорошую корреляцию с человеческой оценкой качества переводов как при сравнении автоматических систем с профессиональными переводчиками, так и при сравнении автоматических систем друг с другом [7]. При проведении сравнения автоматических систем перевода, ав-

торы использовали модели различной сложности, а при сравнении профессиональных переводчиков выбирались эксперты с различным уровнем владения языками.

При проведении экспериментов метрика BLEU вычисляется по тестовым корпусам, подготовленным с помощью профессиональных переводчиков. Для экспериментов на англо-финском направлении использовались тестовые корпуса, подготовленные к конференции WMT-2017 [8]. Размер тестового корпуса для англо-финского составляет 1500 предложений, исходные предложения выбирались из новостных статей. Размер тестового корпуса для русско-казахского составляет 250 предложений, переведенных нанятыми профессиональными переводчиками.

3.3. Оценка качества циклического перевода

В данной работе в рамках улучшения качества перевода в целом предлагается улучшение согласованности переводов одного предложения прямой моделью и обратной ей. Для оценки улучшения согласованности необходимо выяснить, насколько сильно циклических перевод исходного текста искажает этот текст. С этим может помочь уже описанная метрика BLEU, позволяющая вычислять сходство между двумя текстами на одном языке. В данной работе метрику BLEU, рассчитанную для исходных текстов и их циклических переводов, будем называть CycleBLEU, и с ее помощью будем оценивать рост согласованности переводов прямой и обратной ей моделей.

В экспериментах ожидается, что после обучения с циклической функцией потерь (2) будет наблюдаться рост согласованности переводов, который можно будет увидеть с помощью метрики CycleBLEU, даже если прироста BLEU наблюдаться не будет. Это мотивируется тем, что рост согласованности прямой и обратной ей моделей сам по себе является достижением, даже при отсутствии заметного улучшения качества перевода на тестовых наборах.

4. Эксперименты

Теперь перейдем к подробному описанию экспериментов и условий их проведения. Кроме этого, опишем основные результаты, полученные при обучении модели перевода с циклической функцией потерь (2).

4.1. Описание процесса обучения

В проведенных экспериментах все модели перевода были построены на основе архитектуры Transformer. Исследование обучения с нуля с циклической функцией потерь (2) проводилось в конфигурации Transformer-tiny. В данной конфигурации размерность промежуточных векторных представлений составляет 256, а векторные представления внутри FFN блоков обладают размерностью 1024. Малый размер модели был выбран для изучения сходимости модели в условиях высокой дисперсии градиентов, так как в данных экспериментах финальное качество модели не является целью исследования.

В экспериментах с дообучением на циклическую функцию потерь (2) для инициализации моделей брались предобученные без циклической функции потерь (1) модели перевода конфигурации Transformer-base. В данной конфигурации размерность промежуточных векторных представлений составляет 512, а внутри FFN — 2048.

Во всех экспериментах оригинальная архитектура Transformer использовалась с механизмом относительного кодирования позиций [9]. Данный механизм кодирования позиций улучшает качество и уменьшает эффект переобучения под определенные позиции слов в предложении.

Как уже было описано, обучение проводилось с помощью метода Adam. Количество итераций нагрева было выбрано равным 2000 при дообучении. Во время итераций нагрева шаг градиента остается маленьким для накопления статистик, необходимых в алгоритме Adam. После нагрева размер шага обучения составляет 10^{-5} , после чего его значение уменьшается.

Все эксперименты с обучением проводились на вычислительном устройстве с 8 GPU Tesla M40. При этом при обработке пакета данных последний разделялся между всеми GPU, и вычисления проводились параллельно. В момент необходимости пересчета весов модели данные со всех вычислительных устройств объединялись и усреднялись для подсчета градиента.

4.2. Данные для экспериментов

Эксперименты проводятся на англо-финском и русско-казахском языковых направлениях. Обучающие пары текстов для данных экспериментов собраны с помощью обхода интернета и выделения интернет-страниц, имеющих переведенную версию сайта. После нахождения таких пар страницы преобразовываются в текстовый формат и выделяются параллельные предложения. Общее количество найденных таким образом пар предложений для каждого направления оказалось равным приблизительно 50 млн.

Каждый текст из обучения обрабатывается с помощью преобразования WPE [5]. Данное преобразование разделяет каждое слово на составные части некоторым выученным способом, уменьшая при этом общее количество уникальных слов в словаре модели. Данное преобразование помогает сократить количество параметров в модели и улучшает качество. Итоговый размер словаря после преобразования WPE для модели перевода составляет 32 000 токенов.

Кроме параллельных пар предложений в экспериментах с обучением используются синтетические пары. Такие пары можно получить путем перевода текста на целевом языке на входной язык с использованием обратной модели перевода. При использовании синтетических пар в обучении эффект от обучения с циклической функцией потерь (2) может уменьшиться, так как при обучении на таких данных модель уже и без циклической функции потерь получает информацию от обратной модели через синтетические переводы. Именно поэтому для экспериментов были взяты направления, на которых в

открытом доступе существует не так много качественных данных для целевого языка. Количество данных из News Crawl 2018 на целевом языке для создания синтетических пар на русско-казахском составляет 5 млн. предложений, что меньше, чем количество параллельных предложений в 10 раз. Для финского количество текстов на целевом языке составляет 50 млн. предложений, взятых из News Crawl 2014. Количество синтетических данных на англо-финском направлении сравнимо с числом параллельных пар предложений.

При обучении с синтетическими парами принято использовать данные на целевом языке большего объема, чем параллельные. Однако данные на целевом языке должны обладать высоким качеством, в противном случае синтетические примеры ухудшают качество переводных моделей. Для финского и казахского языков в открытом доступе не удалось найти большего количества качественных данных.

4.3. Эксперименты с обучением с нуля

При обучении с циклической функцией потерь (2) удалось получить формулы для вычисления градиентов, которые имеют общее с формулами градиентов из оригинальной статьи [2]. Однако важным отличием является то, что в предложенной функции потерь (2) не используются языковые модели. Хранение языковых моделей в памяти вычислительных устройств существенно ограничит количество свободных ресурсов, что приведет к уменьшению реального количества данных, обрабатываемых на одной итерации обучения. Уменьшение количества обрабатываемых данных на устройстве неизбежно приведет к заметному падению качества.

Кроме того, чтобы уменьшить расход памяти вычислительного устройства, будем оптимизировать только параметры прямой модели с помощью градиентов от циклических переводов (2), а в качестве обратной модели будем использовать уже предобученную. В описанных условиях обучение модели архитектуры Transformer-base с нуля составляет чуть менее двух недель.

Описанные ограничения вычислительных ресурсов делают применение оригинального метода [2] неэффективным для современных нейросетевых архитектур. Поэтому будем исследовать разработанный метод отдельно.

В первую очередь необходимо исследовать сходимость обучения с циклической функцией потерь (2) для современной модели перевода архитектуры Transformer. Для начала исследуем модель с небольшим числом параметров конфигурации Transformer-tiny. Обучение проводится на направлении с английского на финский на описанных параллельных данных с добавлением синтетических.

Качество обученных в течение 30 000 итераций моделей перевода представлено в табл. 1. Можно заметить, что качество обучения с использованием циклической функции потерь (2) значительно уступает обучению без циклических переводов (1). Все данные экспериментов приведены после подбора гиперпараметров обучения и представляют лучшие результаты для каждого

способа обучения. Кроме того, необходимо отметить и низкое значение CycleBLEU при обучении с циклической функцией потерь, хотя предложенный способ обучения должен растить данную метрику почти напрямую.

Таблица 1. Результаты при обучении с нуля на англо-финском направлении

Модель	BLEU	CycleBLEU
Прямая	12,0	50,0
Прямая+обратная	10,0	42,0

Данные результаты объясняются тем, что на первых этапах обучения градиенты, даваемые циклической функцией потерь (3), обладают крайне высокой дисперсией из-за того, что переводы, генерируемые прямой моделью, обладают низким качеством. Для таких переводов оценка обратной моделью является крайне шумной и не несет полезной информации для обучения. Решить данную проблему можно с использованием предобученной модели перевода для инициализации прямой модели в процедуре обучения с циклической функцией потерь (2), так как в таком случае переводы, генерируемые прямой моделью, с самого начала обучения были бы качественными.

4.4. Эксперименты с дообучением моделей

Для инициализации прямой модели в экспериментах с дообучением используется модель архитектуры Transformer-base, обученная до сходимости с функцией потерь без циклических переводов (1).

Данные для дообучения используются те же, что и во время предобучения и включают в себя как параллельные примеры, так и синтетические. Так как размер шага при обновлении весов в процедуре дообучения значительно меньше, качество модели на тестовых наборах во время дообучения может расти и без использования процедуры циклического перевода (2). По этой причине результаты обучения предложенного метода будем сравнивать как с предобученной моделью, так и с дообученной без использования циклических переводов (1).

Результаты дообучения для направления с английского на финский представлены в табл. 2. Качество дообучения с использованием циклической функции потерь (2) дает заметный прирост по BLEU. Таким образом, можно утверждать, что предложенный метод растит общее качество переводной модели даже по сравнению с обычным дообучением.

Таблица 2. Результаты дообучения с циклической функцией потерь для англо-финского направления

Модель	BLEU	CycleBLEU
Без дообучения	23,4	47,0
Прямая	25,0	55,0
Прямая+обратная	25,5	54,5

Результат данного эксперимента может показаться необычным, если сравнить результаты обучения с точки зрения метрики CycleBLEU. При обучении с циклической функцией потерь (2) качество получилось хуже, чем у обычного дообучения (1). Этот результат кажется неожиданным, так как предложенный метод должен напрямую увеличивать согласованность циклических переводов с изначальными текстами. Данный результат объясняется большой долей синтетических переводов в обучающей выборке. Как уже говорилось, использование синтетических данных в обучении, сгенерированных с помощью обратной модели, позволяет передать информацию в прямую модель из обратной еще до использования циклической функции потерь (2). Видимо, в данном эксперименте для высокого качества циклических переводов достаточно синтетических данных.

Рассмотрим теперь эксперименты с дообучением для направления с русского на казахский. Результаты эксперимента приведены в табл. 3. В данном эксперименте также наблюдается рост общего качества перевода, однако меньший, чем на англо-финском направлении.

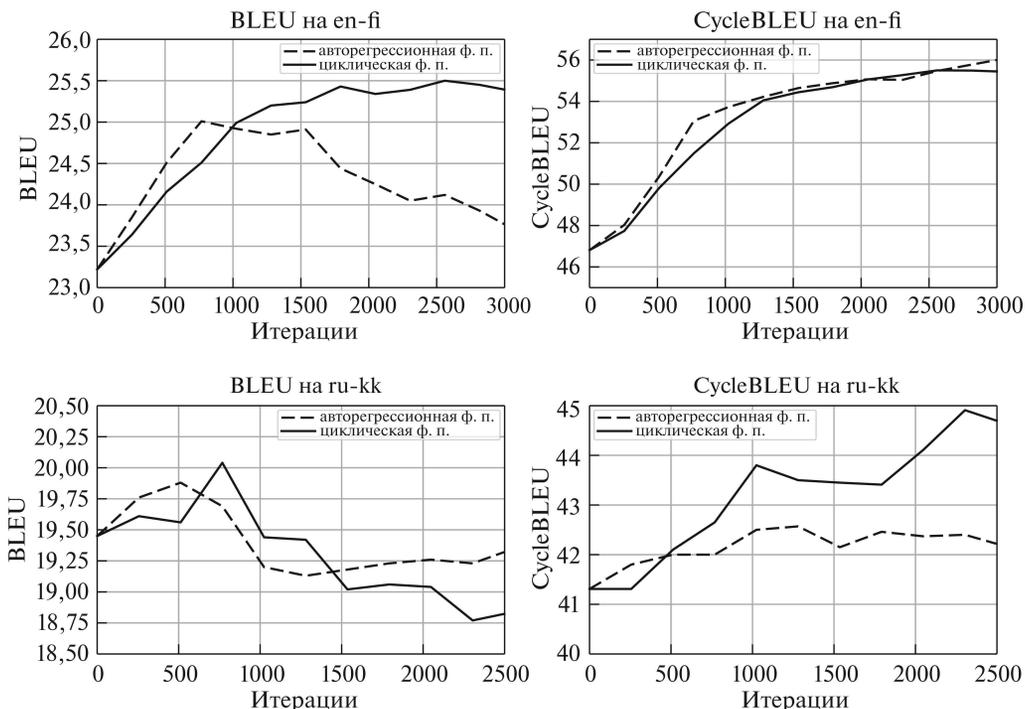
Таблица 3. Результаты дообучения с циклической функцией потерь для русско-казахского направления

Модель	BLEU	CycleBLEU
Без дообучения	19,5	41,5
Прямая	19,80	42,5
Прямая+обратная	20,05	44,9

Если обратить внимание на метрику CycleBLEU, то на данном направлении виден уже существенный прирост метрики при обучении с функцией потерь с циклическими переводами (2). Более заметный по сравнению с экспериментом на англо-финском направлении прирост CycleBLEU объясняется заметно меньшей долей синтетических примеров в обучающей выборке.

На рисунке представлены значения метрик BLEU и CycleBLEU на тестовых наборах в процессе обучения моделей на англо-финском и русско-казахском направлениях. В эксперименте с англо-финским направлением рост качества модели, обученной с циклической функцией потерь (2), больше, а график менее шумный. В то же время прироста по метрике CycleBLEU нет, что объясняется наличием большого количества синтетических примеров в обучающей выборке. На русско-казахском направлении наблюдается небольшой рост BLEU, но при этом виден заметный прирост CycleBLEU. Более высокий шум, который можно видеть на графиках русско-казахского направления можно объяснить малым размером тестового корпуса, который удалось собрать с привлечением профессиональных переводчиков.

В итоге общее число итераций, во время которых качество моделей улучшается при дообучении, не превосходит 3000, что в 10 раз меньше количества



Графики дообучения моделей с использованием циклической функции потерь и без. Верхняя строка соответствует направлению en-fi, нижняя — направлению ru-kk. Первая колонка соответствует графикам BLEU, вторая — графикам CycleBLEU.

итераций, необходимых для обучения модели перевода с нуля. Таким образом, улучшения качества при использовании функции потерь с циклическими переводами (2) удастся добиться при более быстром обучении, чем обучение с нуля, как в оригинальной работе [2].

В целом использование дообучения с циклическими переводами (2) позволяет улучшить качество переводов, хотя прирост оказался меньше, чем заявлялся в оригинальной работе [2]. При этом отдельно стоит отметить вычислительную эффективность предложенной процедуры дообучения, которая позволяет применить совместное обучение с обратной моделью в моделях перевода с современными архитектурами Transformer.

5. Заключение

В данной работе предложен подход для улучшения качества автоматических систем перевода с точки зрения согласованности с переводами обратной модели. Удалось показать, что использование процедуры обучения совместно с обратной моделью растит как общее качество перевода прямых моделей, так

и согласованность переводов обратной модели с исходными текстами. Последнее делает модель перевода более стабильной и уменьшает риск изменения смысла текста при использовании системы.

Вероятностная модель циклических переводов, используемая в ходе разработки метода обучения с обратной моделью, позволила получить формулы для оптимизации переводных моделей, схожие с полученными в работе [2], однако там не было представлено полных обоснований для используемых формул, а предложенные вспомогательные языковые модели делают процесс обучения современных моделей более трудоемким и менее стабильным. Предложенная модель дает пространство для развития и модификации подходов, использующих обратные модели перевода, путем изменения исходной вероятностной модели циклических переводов и добавления регуляризации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Stahlberg F.* Neural Machine Translation: A Review // *J. Artific. Intelligence Res.* 2020. No. 69. P. 343–418.
2. *Yingce Xia, Di He, Tao Qin, et. al.* Dual learning for machine translation // In *Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'16)*. Curran Associates Inc., Red Hook, N.Y. 2016. P. 820–828.
3. *Bahdanau D., Cho K., Bengio Y.* Neural Machine Translation by Jointly Learning to Align and Translate // *CoRR*. 2015. abs/1409.0473.
4. *Kaplan J., McCandlish S., Henighan T., et. al.* Scaling Laws for Neural Language Models // *arxiv.org*
5. *Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., et. al.* Attention is all you need // In *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'17)*. 2017. Curran Associates Inc., Red Hook, N.Y., P. 6000–6010.
6. *Kingma D., Ba J.* Adam: A Method for Stochastic Optimization // *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015, San Diego, CA, May 7–9, 2015. Conference Track Proceedings*.
7. *Papineni K., Roukos S., Ward T., et. al.* Bleu: a Method for Automatic Evaluation of Machine Translation // *Proceedings of the 40th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics*. 2002. P. 311–318.
8. *Bojar O., Chatterjee R., Federmann C., et al.* Findings of the 2017 Conference on Machine Translation (WMT17) // *Proceedings of the Second Conference on Machine Translation*. 2017. Volume 2: Shared Task Papers.
9. *Shaw P., Uszkoreit J., Vaswani A.* Self-Attention with Relative Position Representations // *Proceedings of the 2018 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 2 (Short Papers)*. 2018. P. 464–468.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 23.01.2022

После доработки 30.05.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. К.Я. ХРЫЛЬЧЕНКО (elightelol@gmail.com),
К.В. ВОРОНЦОВ, д-р физ.-мат. наук (vokov@forecsys.ru)
(ФИЦ «Информатика и управление» РАН, Москва)

ОПТИМИЗАЦИЯ ВЕСОВ МОДАЛЬНОСТЕЙ В ТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ТРАНЗАКЦИОННЫХ ДАННЫХ¹

Современные модели обработки естественного языка, такие как трансформеры, работают с мультимодальными данными. В данной работе исследуются мультимодальные данные с помощью мультимодального тематического моделирования над транзакционными данными корпоративных клиентов банка. Предлагается определение важности модальности для модели, на основе которого рассматриваются улучшения для двух сценариев моделирования: сохранение максимального количества информации с помощью балансирования модальностей и автоматический подбор весов модальностей для оптимизации вспомогательных критериев на основе тематических представлений документов.

Предлагается модель добавления численных данных в тематические модели в виде модальностей: каждой теме сопоставляется нормальное распределение с обучаемыми параметрами. Демонстрируются существенные улучшения по сравнению со стандартными тематическими моделями на задаче моделирования корпоративных клиентов банка. На основе тематических представлений клиентов банка прогнозируется 90-дневная просрочка по кредиту.

Ключевые слова: мультимодальное тематическое моделирование, транзакционные данные, классификация, прогноз просрочки по кредиту.

DOI: 10.31857/S0005231022120054, EDN: KRWGVF

1. Введение

Современные модели обработки естественного языка, такие как трансформеры [1, 2], принимают на вход мультимодальные данные: последовательность токенов, их позиций, а также сегментов в исходном тексте; для сессионных рекомендаций [3, 4] в качестве модальностей также используется большое количество дополнительной информации про активность пользователей. Модальность — это отдельный тип метаданных, присутствующий в моделируемых объектах, например, авторы или список литературы в статье. Несмотря на распространенность мультимодальных данных, методы для объединения мультимодальных данных в единое векторное представление объекта имеют

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-07-00936).

эвристический характер — складываются векторы, сформированные для отдельных модальностей. Это разумно только в предположении, что векторы модальностей находятся в едином семантическом векторном пространстве. Другим вариантом является конкатенация векторов с последующим применением многослойного перцептрона.

Примером теоретически обоснованного объединения модальностей, имеющего вероятностную интерпретацию, является мультимодальное тематическое моделирование. В данной работе с помощью тематической модели составляются векторные представления корпоративных клиентов банка на основе мультимодальных транзакционных данных.

Основной гиперпараметр в мультимодальных тематических моделях — это веса модальностей. С их помощью задается влияние каждой модальности на итоговую тематическую модель. Плохо подобранные веса приводят к заглушению одних модальностей и доминации других; в худшем случае мультимодальная тематическая модель превращается в обычную тематическую модель с одной доминирующей модальностью. В разделе 3 приводятся объяснения, почему перебор весов модальностей плохо работает. В работе вводится определение важности модальности, на основе которого решаются следующие задачи: балансировка модальностей с целью сохранения наибольшего количества информации в модели и автоподбор весов модальностей для решения вспомогательной задачи, например, бинарной классификации для документов. В работе доказывается, что мультимодальные тематические представления документов можно представить в виде выпуклой комбинации тематических представлений, построенных для отдельных модальностей.

Предлагаемая в работе оценка оптимальных весов модальностей не требует перебора значений и повторных обучений тематической модели. Кроме того, демонстрируется существенное превосходство предлагаемых техник по сравнению с равными весами модальностей, являющимися, как правило, начальной точкой в любых экспериментах с тематическими моделями. Для демонстрации превосходства предложенных методов решается задача прогноза 90-дневной просрочки выплат по кредиту у корпоративных клиентов банка. В модели получаются интерпретируемые темы, которые можно сопоставить с различными видами экономической деятельности.

Численные характеристики, такие как количество цитирований статьи, обычно добавляются в модели с помощью различных эвристик. В нейронных сетях численные значения преобразуют в векторы с помощью многослойного перцептрона, например, [4] преобразуют время совершения пользовательских действий в векторы с помощью линейного слоя. В данной работе предлагается интерпретируемый вероятностный метод для добавления численных данных в тематические модели. Каждой теме сопоставляется нормальное распределение с обучаемыми параметрами. Полученная адаптация EM-алгоритма для гауссовых модальностей в тематических моделях похожа на EM-алгоритм для смеси гауссиан [5].

Статья содержит следующую структуру. В разделе 2 дается математическая постановка задачи. Раздел 3 посвящен решению проблемы балансирования модальностей. В разделе 4 предлагается метод добавления вещественной информации в качестве модальностей в тематическую модель. Описание экспериментальной установки, а также результаты экспериментов содержатся в разделе 5. В заключительном разделе 6 подведены итоги работы и намечены дальнейшие исследования.

2. Тематическое моделирование

2.1. Обозначения

Тематическое моделирование позволяет сформировать интерпретируемые векторные представления для больших коллекций документов. Модель действует в предположении, что в данных присутствуют некоторые скрытые переменные, называемые темами.

Пусть $D = \{d_1, d_2, \dots\}$ — это коллекция сущностей, являющихся основными объектами моделирования, далее называемых документами. В свою очередь, документы состоят из токенов — в некотором смысле более «мелких», атомарных сущностей. Словарь W — это множество всех уникальных значений токенов.

Каждый документ $d \in D$ представляется как мультимножество $\{w_1, \dots, w_{n_d}\}$, где $w_i \in W \forall i$ и n_d — количество токенов в документе d .

Обозначим за $n := \sum_{d \in D} n_d$ суммарную длину коллекции; n_{dw} — количество раз, которое токен w встретился в документе d .

2.2. Вероятностный латентно-семантический анализ

Основную гипотезу тематического моделирования, предложенную Томасом Хоффманом в модели PLSA [6], можно сформулировать следующим образом: каждой паре (токен w , документ d) в коллекции можно сопоставить некоторую тему t , при этом вероятность появления токена w в документе зависит только от распределения документа по темам.

Появляется вероятностное пространство с множеством элементарных исходов $\Omega = W \times D \times T$ и некоторой вероятностной мерой P , где W, D, T — соответствующие множества токенов, документов и тем. Токены w и документы d являются наблюдаемыми переменными, а темы t — скрытыми.

Тогда условие «наличие токена w в документе зависит только от распределения документа по темам» представляется в виде **гипотезы условной независимости**:

$$(1) \quad p(w | t, d) = p(w | t).$$

Распределение токена $w \in W$ при условии документа $d \in D$ принимает вид

$$\begin{aligned} p(w | d) &= \sum_{t \in T} p(w | t, d) p(t | d) = \{1\} = \\ &= \sum_{t \in T} p(w | t) p(t | d) = \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td}, \end{aligned}$$

где $\Phi \in \mathbb{R}^{|W| \times |T|}$, $\Theta \in \mathbb{R}^{|T| \times |D|}$ — стохастические матрицы², являющиеся параметрами тематической модели.

Решение задачи максимизации логарифма правдоподобия наблюдаемой коллекции документов приводит к оптимальным значениям параметров Φ , Θ

$$\begin{cases} \sum_{d \in D} \sum_{w \in W} n_{dw} \log \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \rightarrow \max_{\Phi, \Theta}, \\ \Phi, \Theta \text{ — стохастические матрицы.} \end{cases}$$

Для решения используется EM-алгоритм [7]. Во время **Е-шага** с помощью теоремы Байеса оценивается распределение скрытой переменной $p(t | d, w, \Phi, \Theta)$ для всех токенов $w \in W$ и документов $d \in D$:

$$\begin{aligned} p_{tdw} &= p(t | d, w, \Phi, \Theta) = \{ \text{теор. Байеса} \} = \\ (2) \quad &= \frac{p(w | t, \Phi) p(t | d, \Theta)}{p(w | d, \Phi, \Theta)} = \frac{\phi_{wt} \theta_{td}}{\sum_{s \in T} \phi_{ws} \theta_{sd}}. \end{aligned}$$

На **М-шаге** решается задача $\mathbb{E}_{p_{tdw}} \log p(w, d, t', | \Phi, \Theta) \rightarrow \max_{\Phi, \Theta}$

$$\begin{aligned} (3) \quad \phi_{wt} &= \text{norm}_{w \in W} \left(\sum_{d \in D} n_{dw} p_{tdw} \right), \\ \theta_{td} &= \text{norm}_{t \in T} \left(\sum_{w \in W} n_{dw} p_{tdw} \right), \end{aligned}$$

где

$$\text{norm}_{x \in X} f(x) := \frac{f(x)}{\sum_{x \in X} f(x)}.$$

Решение можно получить с помощью ККТ [8].

На практике во время обучения модели не принято конструировать тензор p_{tdw} целиком в памяти. Достаточно итерироваться по документам и аккумулировать необходимые статистики. Такой алгоритм обучения тематических моделей называется рациональным EM-алгоритмом.

² Матрица $F \in \mathbb{R}^{m \times n}$ называется стохастической, если $F_{ij} \geq 0$ и $\sum_{i=1}^m F_{ij} = 1$, столбцы образуют вероятностные распределения.

2.3. Мультимодальное тематическое моделирование

Рассмотрим ситуацию, в которой документ включает в себя данные разной природы, т.е. содержит разные модальности. Например, статья состоит из модальности слов и модальности авторов. Словарь для авторов состоит из всех возможных авторов, встречающихся в данной коллекции статей. Модальность m задается словарем W_m и распределением $p(w | t)$, $w \in W_m$, задаваемым стохастической матрицей $\Phi_m = (\phi_{wt} := p(w | t))$.

Чтобы подобрать оптимальные значения параметров, необходимо максимизировать взвешенную сумму логарифмов правдоподобия модальностей в коллекции

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{d \in D} \sum_{w \in W_m} n_{dw} \log \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \rightarrow \max_{\Phi, \Theta}, \\ \Phi_m \forall m, \Theta - \text{стохастические матрицы,} \end{array} \right.$$

где $\lambda_m \geq 0$ — веса модальностей. Для упрощения записи обозначим за Φ конкатенацию матриц $\Phi_m \forall m$, в предположении, что словари модальностей не пересекаются: $W_i \cap W_j = \emptyset$, $i \neq j$.

Е-шаг и обновление матрицы Φ выглядят аналогично PLSA (3). Обновление векторных представлений документов θ_{td} на М-шаге принимает вид

$$\theta_{td} = \text{norm}_t \left(\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W} n_{dw} p_{tdw} \right).$$

3. Взвешивание модальностей

При обучении мультимодальных тематических моделей распространена практика ручного перебора весов модальностей — изначально веса приравнивают к единичным $\lambda_m = 1 \forall m$, затем веса определенных модальностей итеративно увеличивают или уменьшают. У такого подхода две проблемы:

1. При изменении гиперпараметров необходимо переобучать модель. Более того, оценка качества полученной тематической модели является нетривиальной процедурой — ручная оценка интерпретируемости полученных тем или вычисление вспомогательного критерия на основе полученных векторов, зачастую требующее решения некоторой вспомогательной задачи. Простые процедуры, такие как вычисление перспексии, при решении практических задач не помогают найти оптимальные значения гиперпараметров.
2. Ручной подбор оптимальных весов модальностей — крайне не эффективная процедура. В разделе 3.1 доказывається, что оптимальные веса модальностей зависят от частотностей токенов модальностей в документах. Например, если в модели две модальности, одна из которых имеет в среднем сто токенов в документе, а другая один токен, необходимо увеличить вес модальности с одним токеном в сотню раз для примерно

равного влияния обеих модальностей на модель. Примеры таких частотностей очень распространены — текстовые модальности состоят из сотен токенов в документах, в то время как категориальные признаки кодируются одним токеном. Поэтому мультимодальные тематические модели могут быть нечувствительны к небольшим изменениям весов модальностей.

Так как проблема с долгим переобучением моделей несет исключительно вычислительный характер, стоит более детально обсудить проблему доминирующих и заглушаемых модальностей. Доминирующая модальность — это модальность, у которой в среднем много больше токенов в документе, чем у остальных модальностей. У заглушаемой модальности в среднем, наоборот, меньше токенов. При этом и заглушаемые, и доминирующие модальности могут содержать одинаково полезную информацию для тематической модели, а в некоторых ситуациях заглушаемая модальность может быть гораздо важнее. При наличии доминирующей модальности мультимодальная тематическая модель превращается в обычную тематическую модель с одной модальностью. Далее такие тематические модели с одной модальностью будут называться **унимодальными**.

Инициализация весов модальности сбалансированными значениями, предлагаемыми в данной работе, позволяет существенно улучшить тематическую модель. Под сбалансированными весами модальностей имеются в виду веса, при которых каждая модальность вносит равный вклад в векторные представления документов, изменения которых влияют на тематическую модель. В разделе 3.1 дается определение сбалансированных весов модальностей с помощью мультимодального разложения и предлагаются методики для их определения по статистикам исследуемой коллекции документов.

В отсутствие вспомогательной информации разумно предполагать, что вся имеющаяся информация одинаково важна, т.е. все модальности одинаково важны для модели вне зависимости от дальнейшего использования, будь то анализ полученных в коллекции тем или пользовательской активности. На практике часто доступна вспомогательная информация, с помощью которой можно оценить модель, такие как возраст пользователя, факт продолжительного использования сервиса пользователем, просрочка клиента банка по кредиту. При этом тематические векторные представления моделируемых документов можно использовать для решения вспомогательных задач, используя их в качестве входных данных.

Задачи обучения с учителем, решаемые на основе тематических векторных представлений, далее называем **целевыми задачами**. Тематическое моделирование с целевой задачей является наглядным примером признако-ориентированного переноса обучения: модель предобучается на неразмеченных данных, затем используется как один из блоков для построения **целевой модели**, решающей целевую задачу. Разумно предположить, что важность разных типов входных данных тематической модели, т.е. модальностей, за-

висит от рассматриваемой целевой задачи. При предсказании возраста или половой принадлежности пользователя важна разная информация. Веса модальностей сильно влияют на итоговое качество решения целевой задачи.

Наивным подходом для автоподбора весов модальностей для целевой задачи является жадная пошаговая стратегия. Изначально выбирается одна модальность, затем происходит последовательное добавление новых модальностей. Предположим, что ищутся оптимальные веса модальностей $\lambda_1, \dots, \lambda_{|M|}$ на симплексе $\Delta_{|M|} = \{\lambda_m \geq 0 \forall m \in M, \sum \lambda_m = 1\}$, оптимизируя вспомогательный критерий $J(\lambda)$. Пусть на шаге m зафиксированы веса первых m модальностей: $\lambda_1, \dots, \lambda_m \in \Delta_m$. Тогда на шаге $m + 1$ при добавлении модальности $m + 1$ подбирается такое $\alpha \in [0, 1]$, что значения

$$\lambda_1 := \alpha\lambda_1; \dots; \lambda_m := \alpha\lambda_m; \lambda_{m+1} := (1 - \alpha)$$

являются оптимальными весами модальности для критерия $J(\lambda(\alpha))$. Чтобы вычислить $J(\lambda(\alpha))$, необходимо обучить новую тематическую модель с весами модальностей $\lambda(\alpha)$. При наличии целевой задачи придется также переобучать и целевую модель, чтобы получить значение $J(\alpha)$. Для подбора α можно использовать неточный одномерный поиск, например, метод золотого сечения; применить методы оптимизации первого порядка, такие как градиентный спуск, нельзя из-за невозможности обратного распространения ошибки через EM-алгоритм.

Большая часть целевых задач могут быть сформулированы как задачи оптимизации вспомогательного критерия $J(\Theta, w) \rightarrow \min$, где w — это параметры целевой модели. Предлагается методика для автоподбора весов модальностей для решения целевой задачи с дифференцируемым критерием во время M-шага, основанную на мультимодальном разложении (3.1). Данная методика не требует переобучения модели, неточного одномерного поиска или каких-либо других субоптимальных жадных пошаговых стратегий.

3.1. Мультимодальное разложение

Предположим, что сделан E-шаг (2) EM-алгоритма. Другими словами, зафиксируем условное распределение p_{tdw} скрытой переменной t . Пусть n_d^m — это количество токенов модальности m в документе d . Тогда

Теорема 1 (теорема о мультимодальном разложении). *В мультимодальной тематической модели на M-шаге векторные представления документа являются выпуклой комбинацией унимодальных³ векторных представлений*

$$(4) \quad \theta_{td} = \sum_{m \in M} \tau_d^m \theta_{td}^m,$$

³ Унимодальные представления получены с помощью M-шага для унимодальной тематической модели с одной модальностью, при том же значении p_{tdw} .

где

$$\tau_d^m = \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m}, \quad \theta_{td}^m = \text{norm}_t \left(\sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw} \right).$$

Из данной теоремы, доказательство которой приводится в Приложении, следует несколько утверждений:

Следствие 1. Вектор $(\theta_{td}^m)_{t \in T}$ является унимодальным векторным представлением документа d и модальности m . Его можно получить с помощью M -шага (3) для стандартной тематической модели с одной модальностью. При $|M| = 1$ $\theta_{td} = \theta_{td}^m$. Мультимодальное векторное представление документа θ_{td} является комбинацией унимодальных векторных представлений θ_{td}^m .

Следствие 2. Коэффициент τ_d^m задает влияние модальности на мультимодальное представление документа d . При $\lambda_m = 1 \forall m$ у τ_d^m существует вероятностная интерпретация — это вероятность получить токен модальности m , если взять случайный токен из документа d .

Следствие 3. Из того, что $\sum_{m \in M} \tau_d^m = 1$, $\lambda_m \geq 0$ следует, что τ_d лежит на симплексе. А значит, мультимодальное векторное представление документа θ_{td} является **выпуклой** комбинацией унимодальных векторных представлений.

Следствие 4. Веса модальностей $\lambda_m = (n_d^m)^{-1}$ уравнивают влияние различных модальностей на векторное представление документа d ; получаются “равные вероятности” τ_d^m для всех модальностей $\lambda_m = \frac{1}{|M|} \forall m \in M$.

При использовании «небольшой» модальности вместе с «большой» модальностью, например, авторы и текст статьи, необходимо присваивать модальности автора в сотни раз больший вес, чем модальности текста статьи, чтобы модальность авторов оказывала видимое влияние на векторные представления документов.

Важности модальностей τ_d^m задаются отдельно для каждого документа $d \in D$ в коллекции. Чтобы сбалансировать модальности для каждого документа, необходимо вводить новую постановку задачи оптимизации, при которой каждому документу $d \in D$ соответствуют свои веса модальностей λ_d^m , $m \in M$, и присвоить этим весам модальностей значения $\lambda_d^m = (n_d^m)^{-1}$. Если оставаться в рамках стандартной постановки задачи, то предлагается следующая схема взвешивания модальностей:

$$\lambda_m = \mathbb{E}_{p(d)} (n_d^m)^{-1} = \sum_{d \in D} \frac{n_d}{\sum_{d \in D} n_d} (n_d^m)^{-1}.$$

Стоит отметить, что математическое ожидание по $p(d)$ увеличивает влияние длинных документов на итоговые веса модальностей.

Алгоритм 1 (EM-алгоритм с мультимодальным разложением).

1. **Вход:** Φ_k, Θ_k
2. вычислить p_{tdw} для $t \in T, d \in D, w \in W$, используя формулу 2
3. **для всех** $m \in M$ вычислить Φ^m и Θ^m , используя формулу 3
4. вычислить Θ_{k+1} как функцию от Θ^m , с помощью мультимодального разложения по формуле 4
5. вычислить Φ_{k+1} как конкатенацию Φ^1, \dots, Φ^m
6. **Выход:** Φ_{k+1}, Θ_{k+1}

3.2. Целевые задачи

Сбалансированные веса модальностей позволяют избежать потери информации о менее частотных модальностях, нивелируя эффект их заглушения доминирующими модальностями, который в данной работе был явно выражен через мультимодальное разложение в теореме 1. Однако такие сбалансированные веса могут быть неоптимальными для целевых задач. Ниже предлагается метод для автоподбора весов модальностей, оптимальных для решения целевой задачи.

Алгоритм 1 позволяет обучить мультимодальную тематическую модальность с помощью мультимодальной декомпозиции. Он полностью эквивалентен стандартному мультимодальному рациональному EM-алгоритму с точки зрения получаемых параметров модели, однако он вычислительно менее эффективен: необходимо хранить векторные представления для всех модальностей $\Theta_1, \dots, \Theta_m$, в то время как в рациональном алгоритме хранятся только финальные, мультимодальные векторные представления документов Θ . Тем не менее за счет разложения мультимодальных представлений в комбинацию унимодальных векторных представлений появляется возможность корректировать веса модальностей, не обучая новую тематическую модель. Финальные мультимодальные представления документов для заданного набора весов модальностей λ вычисляются с помощью важностей модальностей τ_d^m и векторов θ_{td}^m как выпуклая комбинация.

Пусть $J(\Theta)$ — вспомогательный оптимизационный критерий, который можно оптимизировать по λ, w :

$$\begin{cases} J(\Theta(\lambda), w) \rightarrow \min_{\lambda, w}, \\ \lambda \succeq 0, \\ w \in D, \end{cases}$$

где

$$\Theta_{td} = \theta_{td}(\lambda) = \{4\} = \sum_{m=1}^M \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m} \theta_{td}^m,$$

$\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_M)$ — веса модальностей, D — допустимое множество значений w , например, $D = \{w : \langle w, 1_n \rangle = 1, w \succeq 0\}$.

Рассмотрим в качестве целевой задачи бинарную классификацию документов тематической модели. Каждый документ представляется как вероятностное распределение $(\theta_{td})_{t \in T}$. Будем оценивать вероятность положительного класса для документа d с помощью линейной модели

$$\hat{y}_d = \sum_{t \in T} w_t \theta_{td}, \quad \sum_{t \in T} w_t = 1, \quad w_t \geq 0.$$

Предположим, что вероятность положительного класса зависит только от темы, тогда коэффициент w_t — это вероятность положительного класса для темы t :

$$p(y_d = 1 | d) = \sum_{t \in T} p(y_d = 1 | d, t) p(t | d) = \sum_{t \in T} p(y_d = 1 | t) p(t | d) = \sum_{t \in T} w_t \theta_{td}.$$

Используем мультимодальное разложение

$$\begin{aligned} \hat{y}_d &= \sum_{t \in T} w_t \theta_{td} = \{4\} = \sum_{t \in T} w_t \sum_{m \in M} \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m} \theta_{td}^m = \\ &= \sum_{m \in M} \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m} \hat{y}_d^m = \sum_{m \in M} \tau_d^m \hat{y}_d^m, \end{aligned}$$

где \hat{y}_d^m — это вероятность положительного класса для документа d при наличии в нем только модальности m .

Как было замечено в разделе 3, когда отсутствует информация о полезности тех или иных модальностей для решения целевой задачи, стоит считать их равноважными и использовать сбалансированные веса модальностей. Без балансировки модальности с большой средней мощностью⁴ будут иметь большее влияние на тематическую модель. В случае классификации документов сбалансированные веса $\tau_d^m = 1/|M|$ приводят к усреднению оценок вероятности положительного класса $m \hat{y}_d^m$ по всем модальностям $m \in M$. Получается, что все модальности вносят равный вклад в предсказание; модальности с небольшой средней мощностью будут влиять на данные предсказания также, как и другие модальности, например авторы статьи и текст статьи.

В ситуации когда все-таки задан вспомогательный критерий J , подобрать оптимальные λ и w можно путем минимизации кросс-энтропии

$$\begin{cases} \sum_{d \in D} [y_d \log \hat{y}_d + (1 - y_d) \log \hat{y}_d] \rightarrow \max_{\lambda, w}, \\ \sum_{t \in T} w_t = 1, \quad w \succeq 0, \lambda \succeq 0, \\ \hat{y}_d = \hat{y}_d(\lambda, w). \end{cases}$$

⁴ Мощность модальности — количество токенов этой модальности в документе.

Параметры λ, w можно подобрать для любого дифференцируемого критерия $J(\lambda, w)$ с помощью методов оптимизации первого порядка. В данной работе используется стохастический градиентный спуск. Преобразовать задачу в безусловную оптимизацию можно следующими заменами:

$$\lambda = \exp \hat{\lambda}, \quad w = \text{softmax}(\hat{w}).$$

При оптимизации попеременно делаются шаги спуска по $\hat{\lambda}$ и \hat{w} .

4. Численные модальности

Предположим, что доступен некоторый численный признак или множество численных характеристик для документа, например, суммы транзакций компании или возраст клиента. Предлагается моделировать эти численные значения с помощью нормального распределения.

Теорема 2 (теорема о гауссовых модальностях). Пусть каждой теме $t \in T$ в тематической модели сопоставлена гауссиана $\mathcal{N}(\mu_t, \sigma_t^2)$ с обучаемыми параметрами. Тогда EM-алгоритм для обновления μ, σ^2 и всей тематической модели выглядят следующим образом:

$$\mu_t = \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} \frac{n_{dx} p_{tdx}}{\sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{tdx}} x,$$

$$\sigma_t^2 = \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} \frac{n_{dx} p_{tdx}}{\sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{tdx}} (x - \mu_t)^2,$$

где n_{dx} — это количество раз, которое значение x встретилось в документе d , и p_{tdx} вычисляется во время E-шага: $p_{tdx} = p(t | d, x, \mu_t, \sigma_t)$. M-шаг выглядит идентично M-шагу в стандартной мультимодальной тематической модели.

Вывод EM-алгоритма для мультимодальной тематической модели с гауссовыми модальностями приводится в Приложении. Далее мультимодальные тематические модели с гауссовыми модальностями называются **обобщенными** мультимодальными тематическими моделями.

5. Эксперименты

5.1. Данные

Для экспериментов используются транзакционные данные корпоративных клиентов ПАО Росбанк. Документ порождается транзакциями клиента на заданном интервале времени. Товары и услуги, оказываемые в рамках транзакций, извлекаются из платежных поручений с помощью регулярных выражений. Активность компаний делится на продажи и покупки. Формируются семь различных модальностей: контрагенты (в двух ролях — продавцы и покупатели), товары и услуги (также в двух ролях), а также бизнес сегмент

клиента. В отличие от задач, основанных на текстовых коллекциях, возникают также численные модальности — суммы транзакций покупки и продажи.

Предложенные методы тестируются на задаче классификации документов: предсказывается 90-дневная просрочка выплат по кредиту на горизонте года у корпоративных клиентов банка. В качестве признакового пространства используются тематические векторные представления компаний, полученные из матрицы параметров тематической модели Θ . Количество тем в тематической модели зафиксировано: $|T| = 100$.

В качестве алгоритма классификации используется lightgbm [9] с зафиксированными параметрами: шаг обучения, равный значению 0.1, количество листьев, равное пяти, 50 шагов без улучшений до ранней остановки, и максимальное количество деревьев, равно 10 000. В качестве метрики классификации используется ROC-AUC.

Используется двойная кросс-валидация: данные делятся на 10 равных частей, называемых *внешними фолдами*. Каждый внешний фолд используется как отложенная выборка при обучении на остальных девяти фолдах, объединенных в одну обучающую выборку. Для ранней остановки градиентного бустинга полученная из девяти фолдов обучающая выборка делится на 10 *внутренних фолдов* и обучается 10 lightgbm моделей, каждая из которых использует свой внутренний фолд для ранней остановки. Стоит отметить, что внешние фолды никак не используются при обучении отдельных моделей или подбора гиперпараметров, поэтому полученные на них результаты можно считать валидными. Полученные на 10 внешних фолдах метрики качества усредняются.

Каждый эксперимент повторяется 10 раз с разными зафиксированными состояниями генератора случайности, результаты усредняются.

Кроме того, стоит еще раз отметить признако-ориентированный характер экспериментов — только для 83 тыс. документов в коллекции присутствует разметка, в то время как остальные данные являются неразмеченными и используются только для обучения тематической модели. При автоматическом подборе весов модальностей используется только разметка, попавшая в обучение итоговой целевой модели, т.е. градиентного бустинга.

5.2. Балансирование модальностей

Таблица 1 демонстрирует три различных схемы взвешивания модальностей:

1. $\lambda_d^m = (n_d^m)^{-1}$. Чтобы составить полностью сбалансированные веса модальностей для всех документов, необходимо изменить постановку задачи оптимизации и добавить веса λ_d^m для каждой модальности m и документа d и решить оптимизационную задачу

$$\sum_{\substack{m \in M, \\ d \in D}} \lambda_d^m \sum_{w \in W_m} n_{dw} \log \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \rightarrow \max_{\Phi, \Theta}$$

2. $\lambda_m = \frac{1}{|D|} \sum_{d \in D} (n_d^m)^{-1}$. Данный подход предполагает усреднение обратных мощностей модальностей по всем документам в коллекции.
3. $\lambda_m = \mathbb{E}_{p(d)}(n_d^m)^{-1}$ корректирует прошлый подход с помощью вероятностей документов $p(d) = \frac{n_d}{\sum_{d \in D} n_d}$.

5.3. Численные модальности

Разумно предположить, что суммы транзакций покупок, которые являются, по сути, потраченными компанией деньгами, важны для целевой задачи предсказания дефолта. Тем не менее результаты, представленные в табл. 4, показывают, что использование всей имеющейся информации улучшает метрики на целевой задаче по сравнению с лучшей унимодальной тематической моделью, использующей только суммы покупок.

Таблица 2 демонстрирует три метода добавления численной информации в модель:

1. Предложенные гауссовы модальности.
2. Счетчики. Во время М-шага (3), вместо использования частот n_{dw} , мы используем логарифмы сумм транзакций всех транзакций компании d , в которых встречался токен w . Идея заключается в том, что важность

Таблица 1. Сравнение различных схем взвешивания модальностей

Веса модальностей	ROC-AUC
$\lambda_m = 1$	0,6153 \pm 0,0108
$\lambda_d^m = (n_d^m)^{-1}$	0,6422 \pm 0,0089
$\lambda_m = \sum_{d \in D} (n_d^m)^{-1} / D $	0,6546 \pm 0,0102
$\lambda_m = \mathbb{E}_{p(d)}(n_d^m)^{-1}$	0,6686 \pm 0,0064

Таблица 2. Сравнение различных методов добавления численной информации. Стандартная модель не использует численную информацию. Все модели используют балансировку весов модальностей $\lambda_m = \mathbb{E}_{p(d)}(n_d^m)^{-1}$

Модель	ROC-AUC
стандартная	0,6686 \pm 0,0064
счетчики	0,6716 \pm 0,0084
150 корзин	0,6864 \pm 0,0100
50 корзин	0,6936 \pm 0,0122
100 корзин	0,6945 \pm 0,0095
10 корзин	0,7082 \pm 0,0130
гауссианы	0,126 \pm 0,0109

токенов для документа может быть оценена с помощью сумм транзакций, связанных с этим токеном.

3. Корзины. Все возможные значения численной характеристики разбиваются на n корзин, глядя на значения квантилей.

5.4. Решение целевой задачи

Во время М-шага, после вычисления векторных представлений θ_{td}^m для каждой модальности m , происходит корректировка весов модальностей. Исследуются два аспекта автоподбора:

1. Рестарты. Во время каждого М-шага мы переинициализируем веса модальностей. Отсутствие рестартов означает, что каждый М-шагов начинает корректировку весов модальностей с подобранных на прошлой итерации наилучших значений весов модальностей.
2. Инициализация. Перед автоподбором и, в случае рестартов, перед каждым М-шагом можно инициализировать веса модальностей сбалансированно $\lambda_m = \mathbb{E}_{p(d)}$, либо случайно, значениями из стандартного нормального распределения $\mathcal{N}(0, 1)$.

Веса модальностей λ и параметры линейного классификатора w попеременно оптимизируются шагами стохастического градиентного спуска. В качестве имплементации градиентного спуска используется библиотека для обучения нейросетей PyTorch [10], которая предоставляет возможность экспериментировать с более сложными классификаторами без необходимости собственноручно вычислять градиенты по параметрам.

Результаты представлены в табл. 3.

5.5. Результаты

Предлагаемые подходы сравниваются со стандартной мультимодальной тематической моделью, с лучшей унимодальной тематической моделью, а также с конкатенацией всех унимодальных моделей. Для каждой модальности обучается стандартная унимодальная тематическая модель. Лучшей унимодальной тематической моделью для предсказания дефолта является

Таблица 3. Сравнение различных методик автоподбора весов модальностей для решения задачи бинарной классификации на основе тематических векторных представлений

Рестарты	Сбалансированная инициализация	ROC-AUC
–	–	0,7182 ± 0,0083
+	–	0,7225 ± 0,0111
–	+	0,7283 ± 0,0044
+	+	0,7356 ± 0,0055

Таблица 4. Сравнение стандартной мультимодальной тематической модели, лучшей унимодальной модели, и конкатенации всех унимодальных представлений с предлагаемыми в работе методами

Модель	ROC-AUC
Стандартная	$0,6153 \pm 0,0108$
Сбалансированные веса	$0,6686 \pm 0,0064$
Гауссовы модальности	$0,7126 \pm 0,0109$
Лучшая унимодальная модель	$0,7131 \pm 0,0027$
Автоподбор весов модальностей	$0,7356 \pm 0,0055$
Унимодальная конкатенация	$0,7427 \pm 0,0057$

гауссова модальность с суммами транзакций, в которых компания-документ выступает как покупатель. Стоит отметить, что конкатенация унимодальных векторных представлений документов с точки зрения классификатора, особенно градиентного бустинга над деревьями, избавлена от проблем мультимодальной тематической модели. При конкатенации векторов сохраняется информация обо всех модальностях, отсутствует проблема доминирующих и заглушаемых модальностей. В то же время классификатор может использовать всю полезную информацию из модальностей, так как каждая модальность представлена набором признаков и у классификатора при выборе очередного признака для ветвления есть доступ к признакам всех модальностей.

Результаты, приведенные в табл. 4, приводят к следующим выводам:

1. Сбалансированные веса модальностей, численные модальности, автоподбор весов модальностей позволяют существенно повысить метрики на целевой задаче.
2. Лучшая мультимодальная тематическая модель, использующая предложенные техники, существенно превосходит лучшую унимодальную тематическую модель, что подчеркивает необходимость использования мультимодальных данных.
3. Сравнительно с конкатенацией унимодальных векторных представлений, предложенный подход сохраняет почти все качество, а значит и всю полезную информацию для решения целевой задачи. В некотором смысле мультимодальная тематическая модель — это алгоритм сжатия информации из матрицы встречаемости токенов и документов для разных модальностей, а унимодальная конкатенация — это верхняя оценка на качество, которое можно сохранить при использовании мультимодальных данных.

Тем не менее мультимодальное представление, размерность которого в 7 раз меньше размерности конкатенации (100 против 700), представляет большую практическую ценность — современные масштабные системы для анализа транзакционных данных требуют хранения заранее посчитанных векторных представлений в быстрых key-value хранилищах, память в

которых является крайне ценным и ограниченным ресурсом. Кроме того, с точки зрения исследовательской ценности, мультимодальное представление имеет вероятностную интерпретацию и позволяет анализировать получившийся набор тем, а также оценивать схожесть различных документов и токенов с точки зрения различных векторных мер близости, в то время как конкатенация тематических представлений разных модальностей вероятностной интерпретации не поддается, а также требует дополнительных доработок для оценки близости различных элементов.

6. Заключение

В данной работе исследуется мультимодальность на примере тематических моделей, а также построение тематических моделей на основе транзакционных данных. Основной теоретический результат работы, мультимодальное разложение тематических представлений документов позволяет преобразовать мультимодальные векторные представления в выпуклую комбинацию унимодальных векторных представлений и оценить вклад модальностей в тематическую модель при заданных весах модальностей.

В данной работе предлагаются существенные улучшения для мультимодальных тематических моделей с помощью балансирования модальности и автоматического подбора весов модальностей для решения целевых задач. Вводится понятие численной модальности и демонстрируются существенные улучшения по сравнению с базовыми методами добавления численной информации в тематические модели. Все предложенные методы тестируются на задаче прогнозирования дефолта для корпоративных клиентов банка по транзакционным данным.

В качестве дальнейших исследований можно выделить два основных направления: регуляризацию весов модальностей, например, декорреляцию модальностей, а также расширение предложенных подходов для тематических моделей с регуляризацией [11].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Доказательство теоремы 1.

Покажем, что вероятность θ_{td} темы t в документе d равна выпуклой комбинации θ_{td}^m :

$$\begin{aligned} \theta_{td} &= \frac{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{\sum_{t \in T} \sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}} = \frac{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} \sum_{t \in T} p_{tdw}} = \\ &= \left\{ \sum_{t \in T} p_{tdw} = 1 \right\} = \frac{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw}} = \left\{ \sum_{w \in W_m} n_{dw} = n_d^m \right\} = \end{aligned}$$

$$= \frac{\sum_{m \in M} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m} = \sum_{m \in M} \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m} \frac{\sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{n_d^m} = \sum_{m \in M} \tau_d^m \theta_{td}^m,$$

$$\text{где } \tau_d^m = \frac{\lambda_m n_d^m}{\sum_{m \in M} \lambda_m n_d^m}, \quad \theta_{td}^m = \frac{\sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw}}{n_d^m}.$$

Теорема 1 доказана.

Доказательство теоремы 2.

Разделим оптимизационный критерий для стандартных, $m \in M_s$, и гауссовых, $m \in M_g$, модальностей:

$$\mathcal{L}_s(\Phi, \Theta) := \sum_{m \in M_s} \lambda_m \sum_{t \in T} \sum_{d \in D} \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw} \log \phi_{wt} \theta_{td},$$

$$\mathcal{L}_g(\mu, \sigma, \Theta) := \sum_{m \in M_g} \lambda_m \sum_{t \in T} \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx} \log \mathcal{N}(x | \mu_{mt}, \sigma_{mt}^2) \theta_{td}.$$

Тогда оптимизационная задача на M-шаге выглядит как:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_s(\Phi, \Theta) + \mathcal{L}_g(\mu, \sigma, \Theta) \rightarrow \max_{\Phi, \Theta, \mu, \sigma}, \\ \Theta, \{\Phi_m | m \in M_s\} - \text{стохастические матрицы}, \\ \sigma \succeq 0 \end{cases}$$

и может быть поделена на три оптимизационных задачи.

1. Оптимизационная задача для Θ :

$$\begin{cases} \left[\sum_{t \in T} \left[\sum_{m \in M_s} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw} + \sum_{m \in M_g} \lambda_m \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx} \right] \log \theta_{td} \right] \rightarrow \max_{\Theta}, \\ \sum_{t \in T} \theta_{td} = 1, \\ \theta_{td} \geq 0, \quad t \in T. \end{cases} \quad d \in D;$$

Решение задачи идентично решению для стандартной мультимодальной тематической модели и выводится с помощью ККТ

$$\theta_{td} = \text{norm}_{t \in T} \left[\sum_{m \in M_s} \lambda_m \sum_{w \in W_m} n_{dw} p_{tdw} + \sum_{m \in M_g} \lambda_m \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx} \right], \quad t \in T, \quad d \in D.$$

2. Задача для Φ . Для модальности $m \in M_s$ и темы $t \in T$:

$$\begin{cases} \sum_{w \in W_m} \left[\sum_{d \in D} n_{dw} p_{tdw} \right] \log \phi_{wt} \rightarrow \max_{\Phi^m}, \\ \sum_{w \in W_m} \phi_{wt} = 1, \\ \phi_{wt} \geq 0, \quad w \in W_m. \end{cases}$$

Решение задачи идентично решению задачи для стандартной мульти-модальной тематической модели:

$$\phi_{wt} = \text{norm}_{w \in W_m} \left[\sum_{d \in D} n_{dw} p_{tdw} \right], \quad w \in W_m.$$

3. Нахождение оптимальных μ_t, σ_t^2 . Для модальности $m \in M_g$ и темы $t \in T$

$$\begin{cases} \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx} \left(-\log \sigma_t - (x - \mu_{mt})^2 / (2\sigma_{mt}^2) \right) \rightarrow \max_{\mu_{mt}, \sigma_{mt}} \\ \sigma_{mt} > 0. \end{cases}$$

Достаточно приравнять производные к нулю и решить полученные уравнения

$$\mu_{mt} = \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} \frac{n_{dx} p_{mtdx}}{\sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx}} \cdot x, \quad t \in T, m \in M_g,$$

$$\sigma_{mt}^2 = \sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} \frac{n_{dx} p_{mtdx}}{\sum_{d \in D} \sum_{x \in \mathbb{R}} n_{dx} p_{mtdx}} \cdot (x - \mu_t)^2, \quad t \in T, m \in M_g.$$

Теорема 2 доказана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Vaswani A., Shazeer N., Parmar N. et. al.* Attention is All you Need // Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. V. 30.
2. *Devlin J., Chang M., Lee K., Toutanova K.* BERT: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding // Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long and Short Papers). 2019. P. 4171–4186.
3. *Zhu W., Tao D., Cheng X. et. al.* BERT4Rec: Sequential Recommendation with Bidirectional Encoder Representations from Transformer // CIKM. 2019. P. 1441–1450.
4. *Pavlovski M., Gligorijevic J., Stojkovic I. et. al.* Time-Aware User Embeddings as a Service // Proceedings of SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2020.

5. *Reynolds D.* Gaussian Mixture Models. Boston: Springer, 2009. P. 659–663.
6. *Hoffman T.* Probabilistic Latent Semantic Indexing // Proceedings of the 22nd Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval (SIGIR '99). 1999. P. 50–57.
7. *Dempster A.P., Laird N.M., Rubin D.B.* Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm // J. Royal Statist. Soc. 1977. Series B 39. P. 1–38.
8. *Kuhn H.W., Tucker A.W.* Nonlinear programming // Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. 1950. P. 481–492.
9. *Ke G., Meng Q., Finley Th. et. al.* LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree // Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. V. 30.
10. *Paszke A., Gross S., Massa F. et. al.* PyTorch: An Imperative Style, High-Performance Deep Learning Library // Advances in Neural Information Processing Systems. 2019. V. 30.
11. *Vorontsov V., Potapenko A.* Additive regularization of topic models // Mach. Learn. 101. 2015. P. 303–323.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 31.01.2022

После доработки 18.05.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. В.А. ГРИШИН, канд. техн. наук (vgrishin@cosmos.ru)
(Институт космических исследований РАН, Москва)

ЗАДАЧА ФОРМИРОВАНИЯ ПОКРЫТИЯ ОБЛАСТИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЭТАЛОНАМИ ДЛЯ СИСТЕМ ОПТИЧЕСКОЙ НАВИГАЦИИ

Процесс управления стыковкой некооперируемых космических аппаратов требует информации о взаимном положении активного и пассивного аппаратов. Такую задачу решают оптические системы относительной навигации, анализирующие видимые изображения, идентифицирующие (распознающие) наблюдаемый аппарат и выполняющие измерение относительных линейных и угловых координат. Поскольку ракурс, с которого наблюдается пассивный аппарат, может изменяться в широких пределах (вплоть до полной сферы), соответственно в широких пределах меняется и само изображение пассивного космического аппарата. Поэтому для решения задач идентификации и измерения требуется наличие достаточно большого количества эталонов. В статье предложен способ существенного сокращения количества эталонов, используемых для формирования покрытия области неопределенности.

Ключевые слова: некооперируемая стыковка космических аппаратов, оптическая относительная навигация, распознавание, эталонные изображения.

DOI: 10.31857/S0005231022120066, EDN: KRWINC

1. Введение

В настоящее время существенно расширяется круг задач, в которых используется стыковка с беспилотными космическими аппаратами. Новые задачи связаны с обслуживанием космических аппаратов, пополнением запасов топлива/окислителя, заменой вышедших из строя компонентов космического аппарата, изменением орбиты и др.

В процессе стыковки система управления активного космического аппарата использует информацию о своих координатах относительно пассивного аппарата. В качестве основного источника такой информации сейчас рассматриваются системы оптической навигации, решающие взаимосвязанные задачи идентификации (распознавания) объекта и измерения относительных координат. Основной проблемой является стыковка с некооперируемыми космическими аппаратами. На таких космических аппаратах отсутствует специальная мишень, которая устанавливается на кооперируемых космических аппаратах, изначально предназначенных для выполнения стыковок. Мишень

позволяет производить измерение относительных координат с высокой точностью и надежностью. При некооперируемой стыковке алгоритмы работы оптико-электронных систем по сравнению с алгоритмами, предназначенными для навигации при стыковке с кооперируемыми космическими аппаратами, многократно усложняются. Соответственно, возникает необходимость решения задачи информационного обеспечения процесса стыковки, а именно, подготовки эталонной информации для решения задач распознавания и измерения [1].

В общем случае ракурс наблюдения пассивного аппарата может быть любым (т.е. пассивный аппарат может наблюдаться с любого направления), а расстояние до него изменяться в очень широких пределах. Космический аппарат является конструктивно сложным трехмерным (3D) объектом. Рассмотрим некоторые вопросы отображения (в частности, центральной проекции) точек поверхности 3D объекта на плоскость (в которой располагается фотоприемная матрица). При этом будет введено важное понятие классов эквивалентности отображений. Интересно, что происходит при изменении ракурса наблюдения 3D объекта. Во-первых, при изменении ракурса наблюдения в определенных пределах на плоскость могут проектироваться одни и те же точки 3D объекта. Такие проекции можно назвать топологически эквивалентными, поскольку между ними существует взаимно однозначное взаимно обратимое непрерывное отображение. В качестве примера можно привести наблюдение кубика вдоль линии, проходящей через центр кубика и одну из его вершин. При изменении ракурса наблюдения в окрестности этой линии в довольно широких пределах будем наблюдать те же самые три грани кубика, и любые два таких изображения могут быть преобразованы одно в другое. Более того, если наблюдать этот же кубик вдоль линии, проходящей через центр кубика и противоположную вершину, то можно наблюдать три другие грани кубика. Важно отметить, что эти две проекции задают два класса топологической эквивалентности проекций кубика и несут в себе информацию о множестве **всех возможных проекций** изображения этого кубика. А это множество является несчетным и имеет мощность континуума. Подход, связанный с классами эквивалентности отображений, рассматривается в книге [2]. В этой книге классы эквивалентности формируются при использовании групп преобразований. Следует отметить, что в данном случае речь идет не о яркости точек, а о соответствии образов точек 3D объекта на различных его отображениях (проекциях). Это соответствие ни в коей мере не зависит ни от источников освещения, ни от теней, ни от двухлучевых функций отражательной способности (bidirectional reflectance distribution function) поверхности 3D объекта в каждой точке его поверхности и т.д.

Во-вторых, при изменении ракурса наблюдения 3D объекта проекции одних элементов этого объекта могут перекрывать проекции других элементов. В этом случае эти два отображения уже не будут содержать отображения (проекции) в точности совпадающих множеств точек 3D объекта и не будут являться топологически эквивалентными, поскольку между ними уже

не будет существовать **во всех точках** взаимно однозначного взаимно обратимого непрерывного отображения, а будет наблюдаться топологическая перестройка изображения.

Существует еще и третий случай, когда при изменении ракурса наблюдения точки 3D объекта, расположенные вблизи от границ проекций его точек, “уходят за горизонт” либо “появляются из-за горизонта”. В качестве примера можно привести точки поверхности шара. Формально этот случай можно рассматривать как второй случай. Однако, исключив точки, находящиеся близко от “горизонта”, этот случай можно свести к первому случаю с классами эквивалентности.

Вообще говоря, для анализа топологических перестроек изображений объекта используется аппарат дифференциальной геометрии и теории особенностей (теории катастроф). Достаточно подробно и строго с математической точки зрения данные вопросы изложены в книге [3]. Для описания топологической перестройки изображений (в частности, видимых и невидимых контуров) могут быть использованы так называемые аспектные графы (aspect graphs) [4–7], предложенные Koenderink и van Doorn в 1979 г.

В принципе, количество эталонов, необходимых для распознавания/измерения, должно соответствовать числу топологически не эквивалентных проекций объекта. Однако дискретное представление изображений, которое формируется фотоприемной матрицей, ограничивает возможности по их трансформации. Поэтому требуется некоторое увеличение количества эталонов.

2. Частная форма представления эталонной информации

Существенного упрощения задачи подготовки эталонной информации можно добиться путем использования эталонов специального вида. А именно, предлагается использовать эталоны, состоящие из набора информативных (особых) точек изображения (interest points) с их привязкой к трехмерным координатам пассивного космического аппарата. Трехмерные координаты особых точек получаются из трехмерной конструкторской модели объекта, формируемой в системах автоматизированного проектирования (computer-aided design — CAD), а особые точки формируются при обработке синтезированных системой визуализации изображений объекта в процессе подготовки миссии на Земле. В этом случае топологическая перестройка изображения, возникающая при изменении ракурса, приводит к исчезновению одних особых точек на изображении и к появлению других особых точек.

Указанные преобразования эталонов, состоящих из особых точек, гораздо проще выявлять и оценивать, чем выявлять и оценивать топологические перестройки всего изображения. А самое главное — число эталонов, необходимых для покрытия всей области неопределенности, радикально сокращается.

Остановимся на понятии области неопределенности. Собственно, навигация — это определение местоположения и ориентации движущегося объекта. Соответственно, если требуется решить такую задачу, то, по крайней мере,

один из указанных параметров не определен, либо определен с недостаточной точностью.

Вообще говоря, в практически важных случаях искомые параметры не могут принимать абсолютно произвольные значения. То есть всегда можно указать некую область, в которой может находиться рассматриваемый объект, координаты которого требуется определить. В реальных ситуациях размер таких областей может определяться по данным, поступающим от различных источников навигационной информации. В частности, это могут быть инерциальные навигационные системы, радионавигационные системы, система звездной навигации, спутниковые навигационные системы и др. Таким образом, область неопределенности — это та область, в которой может находиться объект. Решение навигационной задачи приводит к уменьшению области неопределенности.

Для оптических навигационных систем важным параметром является соотношение размера области пространства, в которой эталонное изображение способно обеспечить решение задачи навигации, и размера области неопределенности положения объекта. Если размер области пространства, в которой эталонное изображение способно обеспечить решение задачи навигации, меньше области неопределенности положения объекта, то приходится строить сетку гипотез о возможных положениях объекта, покрывающую область неопределенности, и рассматривать все возможные гипотезы положения объекта в этой области неопределенности. Для каждой гипотезы необходимо наличие, по крайней мере, одного эталонного изображения. Область неопределенности лежит в пространстве той системы координат, которая используется для навигации и управления.

Для описания относительного положения в статье использована сферическая система координат, связанная с корпусом пассивного космического аппарата. По аналогии со сферической географической системой координат используются термины «долгота» и «широта». Начало координат может располагаться на плоскости, на которой располагается либо стыковочная мишень для случая кооперируемой стыковки, либо стыковочный узел, либо иные компоненты, важные для проведения стыковки. Нулевые значения «долготы» и «широты» соответствуют нормали к указанной плоскости. Для описания углового положения активного космического аппарата использовались различные матрицы поворота относительно системы координат, в которой два вектора лежат в указанной плоскости пассивного космического аппарата, а третий — ортогонален к ней.

В тексте уже неоднократно использовался термин «ракурс наблюдения». Уточним этот термин. Ракурс — это направление, с которого наблюдается пассивный космический аппарат в системе координат, связанной с этим самым пассивным космическим аппаратом. В данном случае это сферическая система координат. Активный космический аппарат определяет свое положение также в этой системе координат, поскольку решается задача стыковки с

пассивным аппаратом. Множество ракурсов наблюдения в данном случае параметризовано двумя углами «долготой» и «широтой». С этого направления активный космический аппарат ведет наблюдение пассивного космического аппарата.

Разворот камеры относительно ее оптической оси не учитывается, поскольку дескрипторы, использованные для описания эталонов, инвариантны к повороту. На малых расстояниях до пассивного космического аппарата приходится вводить параметризацию эталонов в зависимости от расстояния по причине влияния перспективных искажений.

Собственно, совокупность таких эталонов для различных ракурсов и используется для распознавания пассивного аппарата. Каждая особая точка снабжается специальным дескриптором, который обеспечивает правильную идентификацию точки на реальном изображении, формируемом камерой на борту активного космического аппарата. К дескриптору предъявляются достаточно жесткие требования по устойчивости к характеру освещения, устойчивости к изменению ракурса наблюдения, ориентации в поле зрения и к изменению масштаба изображения. Удовлетворительными характеристиками обладают дескрипторы особых точек, используемые, например, в алгоритмах SIFT (scale-invariant feature transform) и SURF (speeded-up robust features). Использование эталонов изображений, состоящих из особых точек, как показывает практика, позволяет достаточно успешно решать задачи распознавания изображений, включая задачи навигации [8–10].

Вторым преимуществом такого подхода является то, что особые точки, хорошо локализуемые на изображении и используемые для решения задачи распознавания, также могут быть использованы и для решения задачи относительной навигации, поскольку заданы их трехмерные координаты.

Необходимо отметить, что в процессе создания эталонов оператор должен производить жесткий отбор информативных (особых) точек (interest points), используемых для распознавания и навигации. Это связано с тем, что на изображении космического аппарата присутствует большое количество информативных точек, которые легко обнаруживаются алгоритмами поиска, но не могут быть использованы для навигации, поскольку не имеют жесткой привязки в системе координат, связанной с космическим аппаратом. В первую очередь к ним относятся очень яркие блики на поверхностях с большим коэффициентом отражения. Это, в частности, зеркальная экранно-вакуумная изоляция (multi-layer insulation — MLI), которая покрывает большую часть поверхности корпуса, и ее форма не является стабильной, а также различные полированные металлические элементы, границы очень резких теней на корпусе аппарата от выступающих элементов конструкции, наложение изображений контрастных элементов конструкции, имеющих различное пространственное положение. Реально указанные факторы приводят к тому, что практически для решения задачи навигации пригодно очень небольшое количество точек поверхности космического аппарата. Все это является причиной того,

что процесс формирования эталонных изображений является весьма трудоемким и должен обязательно выполняться под непосредственным контролем квалифицированного оператора.

3. Формирование покрытия как выборки из множества ракурсов с высокой избыточностью

При использовании эталонов, состоящих из набора особых точек изображения, возможно существенное упрощение процедуры формирования минимального покрытия эталонами области неопределенности. Для формирования покрытия области неопределенности сначала покрываем всю область неопределенности достаточно частой сеткой эталонов, например с шагом порядка 1° . Сетка может быть неравномерной, например, как в случае покрытия сферы. Затем необходимо отобрать те эталоны, которые удовлетворяют указанным ниже условиям.

1. Покрытие должно обеспечивать для каждого ракурса наблюдение и распознавание числа информативных точек не меньше заданной величины.
2. Матрица ошибок измерения для каждого ракурса должна удовлетворять заданным требованиям по точности и корреляционным связям между ошибками измерения. Матрица ошибок измерений может быть рассчитана для любой фиксированной конфигурации особых точек.

Теоретически для решения задачи относительной навигации достаточно трех точек. Однако для увеличения точности навигации, снижения коэффициентов корреляции ошибок линейных и угловых координат, а также повышения надежности измерений желательно иметь не менее 7–10 точек.

Если дополнительно построить изображения при разных положениях Солнца, то при такой частой сетке, покрывающей всю область неопределенности, возможно реализовать полуавтоматическую селекцию информативных точек, которые не могут быть использованы для навигации, что обеспечит существенную помощь оператору при формировании эталонных изображений.

При формировании минимального покрытия области неопределенности проблемой является то, что область применимости каждого эталона по ракурсам наблюдения определяется множеством точек, в которых удовлетворяются ограничения, указанные выше. Форма этих областей не является постоянной, зависит от многих факторов и индивидуальна для каждого конкретного эталона. Поэтому получение оптимального покрытия весьма проблематично.

Следует отметить, что прямой перебор вариантов всех возможных покрытий практически невозможен даже для $11 \times 11 = 121$ отсчетов углов ракурса. В [11] показано, что в этом случае число вариантов покрытия, которые необходимо рассмотреть и сравнить, будет равно $2,658 \cdot 10^{36}$. Если принять, что на формирование одного покрытия и оценку его качества требуется всего 1 микросекунда (что очень быстро), тогда на полный перебор потребуется $8,429 \cdot 10^{22}$. Очевидно, что прямой перебор невозможен.

Исходя из технической сущности задачи следует рассматривать только такие покрытия, которые обеспечивают полное покрытие области неопределенности, т.е. когда любая точка области неопределенности покрывается хотя бы одним эталоном. Имеется большое число теоретических работ, относящихся к задачам покрытия. Например, в классической работе [12] получена оценка плотности системы равных кругов, покрывающей бесконечную плоскость. В [13] построены покрытия квадрата равными кругами и даны оценки плотности таких покрытий. В [14] построены покрытия плоскости кругами двух радиусов. В общем, полученные разными авторами теоретические результаты синтеза оптимальных покрытий относятся к покрытиям регулярными фигурами, чаще всего кругами одного радиуса или кругами нескольких заданных радиусов. В рассматриваемом здесь случае и форма областей применимости эталонов может существенно различаться, и размеры этих областей зависят от ракурса формирования эталона.

Остается только численное решение, которое может быть получено путем перебора с возвратами и большим количеством специально разработанных эвристик для сокращения этого перебора. Такой вариант решения представляется неоправданно сложным и трудоемким, тем более что создание такого покрытия является далеко не единственным этапом, которые должны быть реализованы при формировании эталонной информации.

4. Упрощенная процедура формирования выборки

Поскольку синтез покрытия, связанный с перебором вариантов, является достаточно сложным в плане создания набора эвристик, отбрасывающих бесперспективные варианты, поэтому предлагается искать решение задачи синтеза покрытия существенно более простыми средствами, хотя и с возможно меньшей эффективностью, что выразится в использовании несколько большего числа эталонных изображений. Предлагаемый подход также является эвристическим.

Для упрощения задачи разработан алгоритм синтеза покрытия, использующий частую сетку ракурсов (например, с шагом 1°), имеющую регулярную структуру (рис. 1). В качестве такой структуры целесообразно использовать прямоугольную в некоторой, возможно нелинейной, системе координат сетку. Узлы этой сетки соответствуют ракурсам, для которых строятся изображения и формируются соответствующие эталоны. Для определенности будем рассматривать сетку 51×51 углов, охватывающую область $50^\circ \times 50^\circ$ по «долготе» и «широте». Ракурс, оптимальный для стыковки, соответствует нулевым углам «долготы» и «широты».

Для построения сетки эталонов целесообразно использовать введенную ранее сферическую систему координат. Сетка эталонов может быть задана для некоторого пространственного угла, а также легко распространена на всю сферу сферической системы координат, если возникает необходимость распознавать и измерять относительные координаты для любого ракурса на-

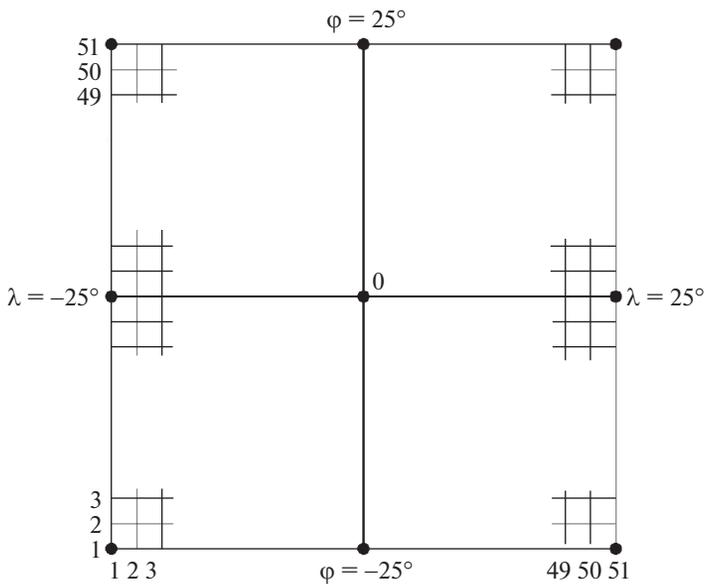


Рис. 1. Формирование сетки эталонов по ракурсам наблюдения, покрывающей всю область неопределенности.

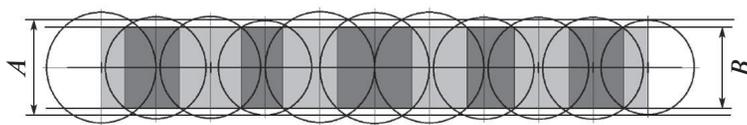


Рис. 2. Формирование горизонтальной полосы покрытия.

блюдения пассивного аппарата. Поскольку наибольший интерес представляет обычно только один пространственный (телесный) угол, в центре которого находится либо стыковочная мишень, либо стыковочный узел, либо иной конструктивный элемент пассивного космического аппарата, используемый для стыковки, то набор эталонов строится для четырехгранного телесного угла сферы.

На рис. 2 показаны условные области применимости эталонов для значения «широты», равной 0° . Областью применимости для каждого эталона является то множество ракурсов, для которых эталон может быть использован, поскольку в этих точках удовлетворяются указанные ранее два условия. Поскольку рисунок является иллюстративным, то форма областей применимости выбрана круговой. Реально и конфигурация, и размеры этих областей зависят от ракурса, для которого синтезирован эталон. На рисунке для упрощения показаны области применимости 11 эталонов, а реально для нашей сетки их количество равно 51 для одной полосы. Кроме того, реальные эталоны в полосе имеют гораздо большее перекрытие областей применимости, которые имеют размер порядка $10\text{--}30^\circ$.

На рисунке показаны два размера. Первый размер — A — соответствует наименьшему вертикальному размеру области применимости из всех эталонов, находящихся в полосе. Второй размер — B — соответствует минимальному вертикальному размеру **объединения областей** применимости всех эталонов, находящихся в полосе.

Для упрощения задачи построения перейдем от задачи покрытия к задаче замощения, т.е. созданию покрытия без пробелов и двойных покрытий. При замощении будем рассматривать прямоугольные фрагменты областей покрытия, полностью находящиеся в области применимости каждого эталона. При этом прямоугольные фрагменты, из которых строится замощение, укладываются стык в стык (без перекрытия), а полные области применимости перекрываются.

Для упрощения процедуры замощение строится горизонтальными полосами. Вертикальный размер прямоугольных фрагментов в каждой полосе один и тот же, горизонтальный размер может отличаться в пределах одной полосы. Вертикальный размер различных полос также может быть различным.

Построение замощения начинаем из центра, т.е. из области покрытия для ракурса с равными нулю обоими углами, что соответствует индексам решетки $(26, 26)$. Целью является удаление максимального числа эталонов из этой полосы для обеспечения минимального покрытия. При удалении части эталонов минимальный вертикальный размер объединения B при этом неизбежно уменьшится. Поэтому задаем новое значение вертикального размера B , уменьшенное на $\Delta = 2 - 4^\circ$. Теперь строим замощение полосы, последовательно перебирая эталоны и строя для каждого прямоугольник максимального размера по горизонтали. Вертикальный размер всех прямоугольников один и тот же, на $\Delta = 2 - 4^\circ$ меньше начального значения размера B . Замощение строим в положительном направлении от центрального эталона и в отрицательном направлении. Если на каком-то этапе при переборе эталонов по строке с шагом 1° получилась «щель» между прямоугольными областями замощения, делаем возврат на один шаг и уменьшаем ширину прямоугольной области, чтобы избежать двойного покрытия. Если дошли до границ сетки, то проверяем количество точек привязки на этих границах. Если оно меньше заданной величины, то вставляем дополнительные эталонные изображения. Может так получиться, что на одном крае полосы или на обоих краях пара эталонов расположена слишком близко. Поэтому может возникнуть соблазн разместить точки более равномерно, улучшив тем самым покрытие. Однако такие попытки чаще всего требуют многократных перестановок, и более эффективным методом получения более равномерного распределения эталонов является небольшое изменение величины Δ и повторное построение замощения полосы. Ширина построенных прямоугольных областей может меняться в зависимости от положения в полосе. Как правило, при движении к концам полосы ширина прямоугольных областей уменьшается.

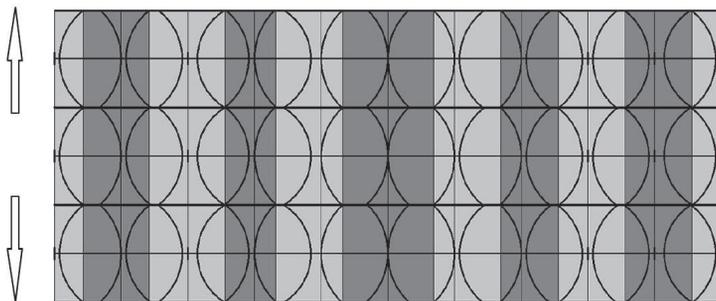


Рис. 3. Последовательное построение полос покрытия вверх и вниз от первой построенной полосы.

Далее по такому же алгоритму последовательно строятся полосы выше и ниже уже построенной полосы — рис. 3.

Если строим полосу, лежащую выше уже построенной полосы, то добиваемся, чтобы нижняя граница новой полосы вплотную примыкала к верхней границе уже построенной полосы. Аналогично, если строим полосу, лежащую ниже уже построенной полосы, то добиваемся того, чтобы верхняя граница новой полосы вплотную примыкала к нижней границе уже построенной полосы. Если на верхней или нижней границе всей области $50^\circ \times 50^\circ$ не выполнены условия применимости, то вставляем дополнительную полосу с центрами, расположенными на соответствующей границе. Ширина этих полос может уменьшаться по мере отдаления от центральной полосы. На рис. 3 для упрощения ширина прямоугольных областей в разных полосах показана одинаковой. На практике они обычно различаются.

Далее строим таблицу, связывающую ракурс в пределах $\pm 25^\circ$ по каждому из углов с конкретным эталоном, который должен быть использован для распознавания и навигации. Оценка ракурса формируется на этапе грубого распознавания пассивного космического аппарата.

Для отработки алгоритма синтеза покрытия области неопределенности была разработана простая модель области применимости. Эта модель построена на основании проведенных экспериментов для сетки эталонов малой размерности — 11×11 с шагом 5° . Модель числа точек, для которых устанавливается соответствие, имеет вид

$$K(i, i_0, j, j_0) = [(\eta_{i_0, j_0} + A_0 - \mu_{i, j}) * \exp(-(\alpha(i - i_0)^2 + \beta(j - j_0)^2))].$$

Здесь квадратные скобки обозначают целую часть числа;

i_0, j_0 — индексы, соответствующие ракурсу наблюдения, для которого сформирован эталон;

i, j — индексы, соответствующие направлению, для которого определяется число точек, для которых устанавливается соответствие;

$\mu_{i, j}$ — случайная величина с равномерным распределением в интервале $[0, 1]$;

η_{i_0, j_0} — случайная величина с равномерным распределением на отрезке $[0, 3]$;

A_0 — минимальное число особых точек, которым должен обладать эталон; установлено значение $A_0 = 20$.

При использовании этой формулы в каждой точке (i, j) проверяется условие

$$K(i_0, i_0, j_0, j_0) \geq K(i, i_0, j, j_0).$$

Если это условие в какой-то точке области применимости эталона нарушено, то значение $K(i, i_0, j, j_0)$ заменяется на $K(i_0, i_0, j_0, j_0)$. Коэффициенты α, β отражают зависимость области применимости эталонов от ракурса визирования. Это обычно происходит, когда большая часть наблюдаемой поверхности для ракурса i_0, j_0 приблизительно ортогональна направлению визирования.

Таким образом, следующие выражения имитируют распределение точек привязки, которое приблизительно изотропное для нулевого ракурса (26, 26) и имеет тенденцию к сжатию носителя при отклонении от нулевого ракурса:

$$\alpha = \alpha_0 \left(1 + a \frac{|i_0 - 26|}{25} \right),$$
$$\beta = \beta_0 \left(1 + b \frac{|j_0 - 26|}{25} \right).$$

Заданы следующие параметры $\alpha_0 = 0,01, a = 1, \beta_0 = 0,01, b = 1$.

На рис. 4 приведены профили области применимости девяти эталонов в линиях уровня. На рис. 5 приведен профиль построенного покрытия также в линиях уровня. Минимальное количество визируемых особых точек, удовлетворяющих указанным выше двум условиям для любого ракурса в пределах $50^\circ \times 50^\circ$, было задано равным 7.

Таким образом, чтобы покрыть область неопределенности размером $50^\circ \times 50^\circ$ из общего количества 2601, были отобраны 28 эталонов, или 1,076%. Качество построенного покрытия можно приблизительно определить как отношение суммы площадей областей применимости использованных эталонов к площади покрываемого пространства, равной $51 \times 51 = 2601$. У построенного покрытия это отношение равно 1,772. Для оптимального покрытия бесконечной плоскости кругами в [10] получена оценка эффективности покрытия, которая имеет вид

$$D \leq \frac{\pi}{\sqrt{27}} = 1,209 \dots$$

D — это отношение суммарной площади всех кругов, покрывающих область, к площади всей области. Таким образом, построенное покрытие можно считать приемлемым с учетом простоты использованного алгоритма, а также того, что покрывается ограниченная область, а не бесконечная плоскость.

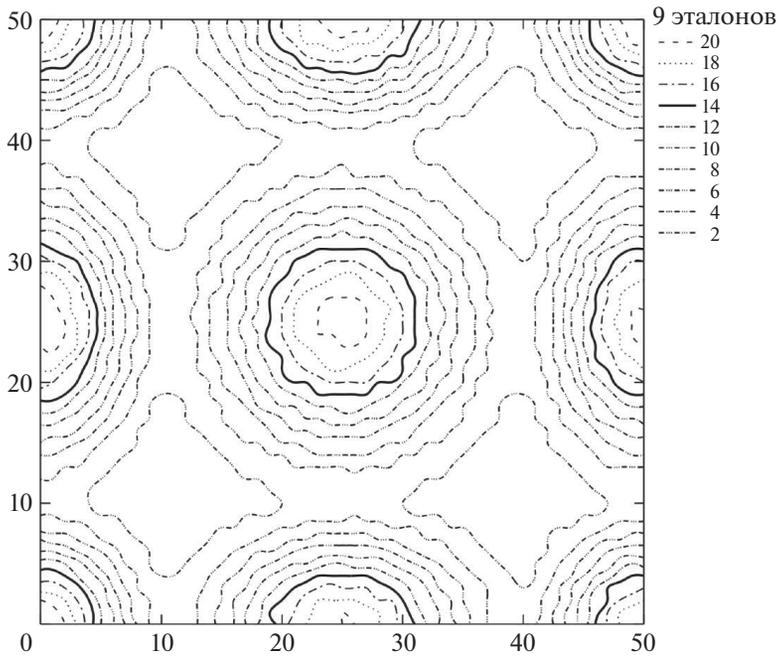


Рис. 4. Профиль применимости девяти эталонов в линиях уровня для девяти точек, выделенных на рис. 1.

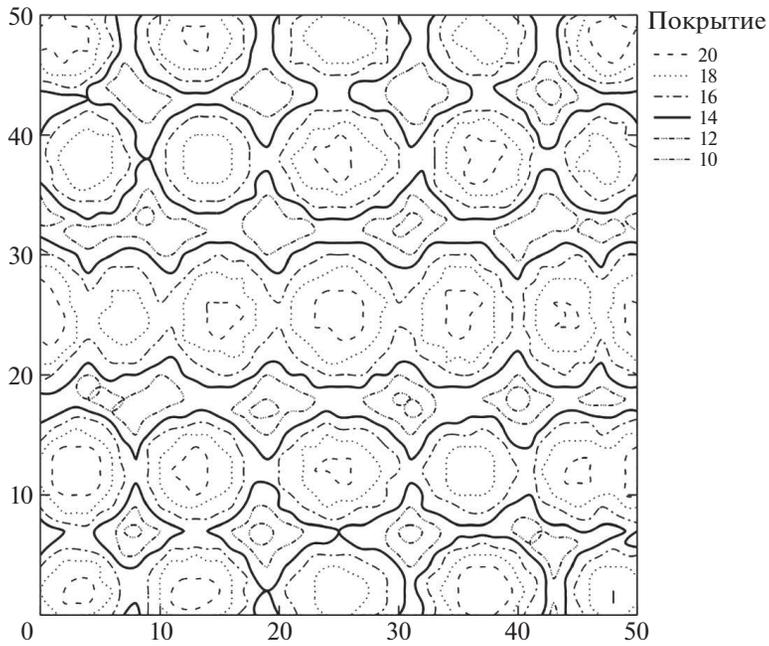


Рис. 5. Профиль применимости построенного покрытия области неопределенности.

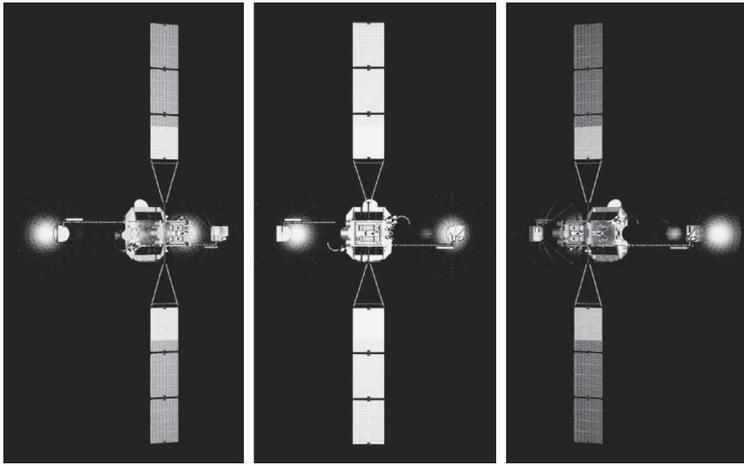


Рис. 6. Синтезированное изображение космического аппарата при трех различных значениях угла «долготы».

Рассмотрим несколько иллюстраций. На рис. 6 представлены три синтезированных изображения некоторого абстрактного космического аппарата. Слева и справа от корпуса аппарата видны солнечные блики на поверхности больших параболических антенн. Сами параболические антенны при таком освещении не просматриваются.

Вариации яркости панелей солнечных батарей на левом и правом изображениях обусловлены, скорее всего, геометрическими и фотометрическими погрешностями синтеза изображений программой рендеринга общего назначения. Для визуализации космических аппаратов в ряде стран разработаны специализированные программы рендеринга с гораздо более жесткими требованиями к величине геометрических и фотометрических ошибок, чем те, которые установлены для программ рендеринга общего назначения. Иллюстрации показывают, насколько сильно изменяется вид центральной части (корпуса космического аппарата) при изменении ракурса наблюдения на $\pm 25^\circ$ только по одной координате («долготе»). Очевидно, что для перекрытия области изменения ракурсов по двум координатам $50^\circ \times 50^\circ$ потребуется значительное число эталонов.

Иллюстративное изображение результатов установления соответствия особых точек представлено на рис. 7. Это изображение иллюстративное в том смысле, что оно позволяет понять, как произошло установление соответствия.

На рисунке показан результат установления соответствия для шести особых точек эталона. Реально, при благоприятной ситуации, происходит установление соответствия нескольких десятков точек (что делает визуальный анализ результатов установления соответствия особых точек достаточно сложным и требует нескольких итераций). На рисунке только для одной из шести особых точек соответствие установлено неправильно. Обычно доля ошибочно установленных соответствий больше чем $1/6$. Одной из причин

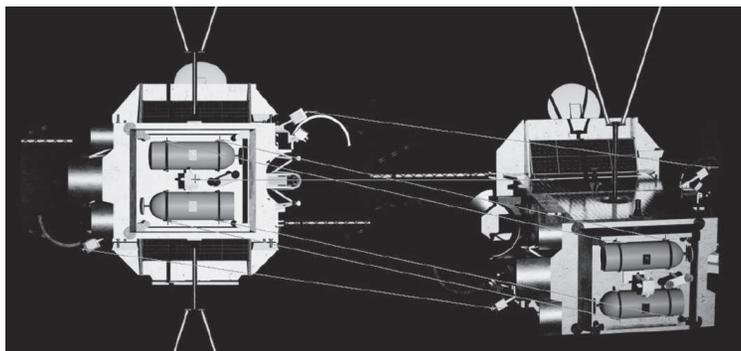


Рис. 7. Установление соответствия особых точек эталона (слева) и изображения полученного для другого ракурса (справа).

этого является то, что дескрипторы особых точек, построенные на основе широко распространенных дескрипторов SIFT и SURF, на высококонтрастных изображениях склонны к вырождению. Поэтому их эффективность снижается.

Для автоматического выявления точек, для которых соответствие установлено неправильно, используются специальные алгоритмы. Кроме того, на рис. 7 особые точки располагаются симметрично, что на практике при работе в автоматическом режиме наблюдается крайне редко. Характер расположения особых точек и степень их симметричности оказывают очень сильное влияние на точность измерений. Приведенное изображение как раз и было получено при экспериментальной оценке степени влияния симметрии положения особых точек на ошибки измерения.

5. Заключение

В работе представлен простой способ формирования покрытия области неопределенности эталонами для решения задач относительной навигации при стыковке с некооперируемыми космическими аппаратами. Качество синтезированных покрытий может считаться приемлемым для практических приложений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гришин В.А., Бережков А.В.* Информационное обеспечение задач стыковки космических аппаратов (подготовка эталонов и отработка алгоритмов распознавания и измерения) // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2020. Т. 17. № 7. С. 50–57.
<https://doi.org/10.21046/2070-7401-2020-17-7-50-57>
2. *Файн В.С.* Опознавание изображений. Основы непрерывно-групповой теории ее приложения. М.: Наука, 1970.

3. *Форсайт Д., Понс Ж.* Компьютерное зрение. Современный подход. Пер. с англ. М.: Издательский дом “Вильямс”, 2004.
4. *Bowyer K.W., Dyer C.R.* Aspect graphs: an introduction and survey of recent results // Proc. of the SPIE 1395, Close-Range Photogrammetry Meets Machine Vision, 13950R. Zurich, Switzerland, 1990. <https://doi.org/10.1117/12.2294270>
5. *Eggert D.W., Bowyer K.W., Dyer C.R.* Aspect graphs: State-of-the-art and applications in digital photogrammetry // Proc. of the ISPRS 17th Congress: Int. Archives Photogrammetry Remote Sensing. 1992. Pt. 5. P. 633–645.
6. *Van Efferterre T.* Aspect graphs for visual recognition of three-dimensional objects // Perception. 1994. V. 23. No. 5. P. 563–582. <https://doi.org/10.1068/p230563>
7. *Yang C.C., Marefat M.M., Johnson E.J.* Entity-based aspect graphs: Making viewer centered representations more efficient // Pattern Recogn. Lett. 1998. V. 19. No. 3–4. P. 265–277. [https://doi.org/10.1016/S0167-8655\(98\)00006-3](https://doi.org/10.1016/S0167-8655(98)00006-3)
8. *Lowe D.G.* Distinctive Image Features from Scale-Invariant Keypoints // Int. J. Comput. Vision. 2004. V. 60. P. 91–110. <https://doi.org/10.1023/B:VISI.0000029664.99615.94>
9. *Chen Yu-lang, Gao Jing-min.* SURF-Based Image Matching Method for Landing on Small Celestial Bodies // Proc. of the 2019 International Conference on Modeling, Analysis, Simulation Technologies and Applications (MASTA 2019). Hangzhou, China, 2019. P. 401–407. <https://doi.org/10.2991/masta-19.2019.68>
10. *Qu X., Soheilian B., Habets E., Paparoditis N.* Evaluation of SIFT and SURF for vision based localization // The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences. 2016. V. XLI-B3. P. 685–692. <https://doi.org/10.5194/isprs-archives-XLI-B3-685-2016>
11. *Гришин В.А.* Постановка задачи формирования оптимального покрытия области неопределенности эталонами для систем оптической навигации // Математические методы распознавания образов: Тез. докл. 20-й Всеросс. конф. с международным участием, г. Москва 2021 г. М.: РАН, 2021. С. 187–189. URL: http://machinelearning.ru/wiki/images/0/02/Mmpr_2021.pdf.
12. *Том Л.Ф.* Расположения на плоскости, на сфере и в пространстве. Пер. с немецкого И.М. Макаровой. М.: Физматлит, 1958.
13. *Tarnai T., Gáspár Z.* Covering a square by equal circles // Elemente der Mathematik. 1995. V. 50. No. 4. P. 167–170. <https://doi.org/10.5169/seals-46351>
14. *Kennedy T.* Compact packings of the plane with two sizes of discs // Discret. Comput. Geometry. 2006. V. 35. No. 2. P. 255–267. <https://doi.org/10.1007/s00454-005-1172-4>

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 21.01.2022

После доработки 14.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. Н.С. КОРОЛЕВ (korolev.nikolay.s@gmail.com)
(Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова),
О.В. СЕНЬКО, д-р физ.-мат. наук (senkoov@mail.ru)
(ФИЦ “Информатика и управление” РАН, Москва)

МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОБУЧЕНИЯ ГРАДИЕНТНОГО БУСТИНГА, ОСНОВАННЫЙ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФУНКЦИЯХ ПОТЕРЬ

Рассматривается новый метод повышения качества обучения градиентного бустинга, а также увеличения его обобщающей способности, основанный на использовании модифицированных функций потерь. В ходе выполнения вычислительных экспериментов была показана возможная применимость данного метода для улучшения качества градиентного бустинга, решающего различные задачи классификации и регрессии на реальных данных.

Ключевые слова: градиентный бустинг, дерево решений, функции потерь, машинное обучение, анализ данных.

DOI: 10.31857/S0005231022120078, EDN: KSLBAE

1. Введение

Методы машинного обучения широко используются при решении разнообразных прикладных задач [1–3], в которых требуется предсказать значения некоторой неизвестной величины по значениям известных показателей объектов. В последние годы все большее распространение приобретают ансамблевые методы [4, 5], среди которых следует выделить методы, использующие ансамбли регрессионных или решающих деревьев. Известными способами генерации ансамблей являются метод бэггинга и метод случайных подпространств, используемые в случайных лесах, а также метод градиентного бустинга. Эффективность случайных лесов и ансамблевых методов, основанных на градиентном бустинге, подтверждается обширной практикой решения прикладных задач. Вместе с тем убедительные теоретические обоснования их оптимальности отсутствуют. Все это свидетельствует об актуальности исследований, направленных на поиск новых критериев оптимальности генерируемых ансамблей и методов вычисления коллективных решений, которые позволили бы увеличить обобщающую способность ансамблевых алгоритмов. В [6] рассматривается схема поиска ансамбля регрессионных деревьев с минимальной квадратичной ошибкой для среднего прогноза по ансамблю. При этом регрессионные деревья, входящие в ансамбль, генерируются с помощью процедуры бэггинга и дополнительного одношагового градиентного спуска. В настоящей работе анализируется связь схемы с минимальной ошибкой для среднего прогноза со стандартной процедурой градиентного бустинга. Показано, что данная схема по сути сводится к относительно небольшой моди-

фикации стандартной процедуры, которая тем не менее позволяет добиться заметного увеличения обобщающей способности.

2. Модификация градиентного бустинга

Обозначим: x_1, \dots, x_N — точки в некотором многомерном пространстве, соответствующие известным и легко измеряемым признакам реальных объектов; y_1, \dots, y_N — значения некоторых трудно измеряемых признаков объектов. Встает задача поиска некоторой функции $f(x)$ такой, что $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$, где ε_i — ошибка предсказания на i -м объекте, т.е. функция $f(x)$ должна приближать реальную зависимость между искомыми значениями y_i и известными признаками x_i . Для построения функции $f(x)$ используется информация лишь о некоторых $T < N$ объектах, а качество приближения проверяется по оставшимся $N - T$ объектам.

Данная задача хорошо решается методами ансамблирования, основанными на построении большого количества деревьев решений. Одним из таких методов является градиентный бустинг [7]. В этой работе стоит задача улучшения качества работы данного метода за счет изменения процедуры обучения градиентного бустинга с использованием модифицированных функций потерь.

2.1. Градиентный бустинг

Пусть:

X — матрица из T строк, i -я строка равна x_i ;

Y — вектор из T элементов, i -й элемент равен y_i .

Градиентный бустинг [7] основан на итеративном построении функции $f(x)$ за счет использования большого количества деревьев решений, каждое из которых исправляет ошибки предыдущих. Изначально задается оптимизируемый функционал. Одним из стандартных оптимизируемых функционалов является среднеквадратичная ошибка $L(f(x), X, Y) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (f(x_i) - y_i)^2$. Также вводится некоторое начальное значение функции предсказания $f_0(x) = 0$ или $f_0(x) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T y_i$. Далее итеративно строятся функции $f_i(x) = f_{i-1}(x) + \beta_i h_i(x)$, где $h_i(x)$ — дерево решений, обученное по следующей схеме:

Алгоритм 1 (оригинальный алгоритм градиентного бустинга).

1. Из выборки X, Y при помощи метода бутстрапирования и случайной проекции на произвольное подпространство признаков получается новая выборка \hat{X}_i, \hat{Y}_i .

2. Находится антиградиент функции потерь по функции f в точке текущего ансамбля $\hat{h}(x) = -\nabla_f(L(f(x), \hat{X}_i, \hat{Y}_i)) \Big|_{f(x)=f_{i-1}(x)}$.

3. Строится дерево решений $h_i(x)$ по выборке $\hat{X}_i, \hat{h}(\hat{X}_i)$.

4. $f_i(x) = f_{i-1}(x) + \beta_i h_i(x)$, где $\beta_i \in \mathbb{R}$ — некоторый коэффициент, с которым добавляется дерево $h_i(x)$ в уже существующий лес $f_{i-1}(x)$.

Спустя некоторое заранее оговоренное количество итераций процесс останавливается и очередное $f_i(x)$ считается искомым $f(x)$.

При этом возможно достаточно большое количество выбора стратегий β_i . Наиболее известными являются:

- $\beta_i = \text{const}$,
- $\beta_i = \frac{\text{const}}{\sqrt{i+1}}$,
- $\beta_i = \frac{\text{const}}{i+1}$,
- $\beta_i = \arg \min_{\beta} L(f_{i-1}(x) + \beta h(x), \hat{X}_i, \hat{Y}_i)$.

Также существуют различные модификации градиентного бустинга, позволяющие улучшить его обобщающую способность и скорость работы, такие как CatBoost [8], XGBoost [9], LightGBM [10].

2.2. Измененный алгоритм градиентного бустинга

В данной статье придется изменить алгоритм градиентного бустинга. Изменим шаг 2. Вместо того, чтобы брать функцию, равную антиградиенту функции потерь, будем искать такую функцию $\hat{h}(x)$, добавка которой к исходной функции $f_{i-1}(x)$ приведет к минимизации функции потерь, т.е. $L(f_{i-1}(x) + \hat{h}(x), \hat{X}_i, \hat{Y}_i) \rightarrow \min_{\hat{h}(x)}$.

Алгоритм 2 (измененный алгоритм градиентного бустинга).

1. Из выборки X, Y при помощи метода бутстрапирования и случайной проекции на произвольное подпространство признаков получается новая выборка \hat{X}_i, \hat{Y}_i .

2. Находится такая функция $\hat{h}(x)$, что функция потерь от функции $f_{i-1}(x) + \hat{h}(x)$ на выборке \hat{X}_i, \hat{Y}_i будет минимальна: $L(f_{i-1}(x) + \hat{h}(x), \hat{X}_i, \hat{Y}_i) \rightarrow \min$. Приравнявая градиент функции потерь к нулю, получим

$$\nabla_{\hat{h}(x)} L(f_{i-1}(x) + \hat{h}(x), \hat{X}_i, \hat{Y}_i) = \frac{2}{T} \sum_{k=1}^T (f_{i-1}(\hat{x}_k^i) + \hat{h}(\hat{x}_k^i) - \hat{y}_k^i) = 0,$$

$$\hat{h}(\hat{x}_k^i) = \hat{y}_k^i - f_{i-1}(\hat{x}_k^i),$$

где \hat{x}_k^i, \hat{y}_k^i — признаки k -го объекта в выборке \hat{X}_i, \hat{Y}_i .

3. Строится дерево решений $h_i(x)$ по выборке $\hat{X}_i, \hat{h}(\hat{X}_i)$.

4. $f_i(x) = f_{i-1}(x) + \beta_i h_i(x)$, где $\beta_i \in \mathbb{R}$ — некоторый коэффициент, с которым добавляется дерево $h_i(x)$ в уже существующий лес $f_{i-1}(x)$.

Заметим, что в случае, когда функция ошибки L зависит квадратично от функции $f(x)$ и при этом коэффициент при $f^2(x)$ не зависит от значе-

ний выборки, предложенный измененный алгоритм градиентного бустинга полностью совпадает с оригинальным вариантом (с точностью до изменения learning rate'a, который в данном случае обозначается как β_i).

3. Модифицированные функции потерь

3.1. Разложение ошибки

Для произвольного ансамбля алгоритмов известно [11] разложение ошибки ансамбля на смещение отдельных алгоритмов и дисперсию. Сформулируем это разложение в виде теоремы.

Теорема 1. Пусть x, y — произвольные случайные величины; даны K функций $h_k(x)$, и функция $f(x)$ задана как среднее арифметическое этих K функций:

$$f(x) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K h_k(x),$$

тогда верно:

$$(1) \quad \mathbb{E}(y - f(x))^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - y)^2 - \mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2].$$

Доказательство.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}(h_k(x) - y)^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}(h_k(x) - f(x) + f(x) - y)^2 = \\ & = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2 - 2\mathbb{E}[(h_k(x) - f(x))(y - f(x))] + \mathbb{E}(y - f(x))^2] = \\ & = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2 + \mathbb{E}(y - f(x))^2] - \\ & \quad - \frac{2}{K} \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^K (h_k(x) - f(x))(y - f(x)) \right] = \\ & = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2 + \mathbb{E}(y - f(x))^2] - \\ & \quad - \frac{2}{K} \mathbb{E} \left[(y - f(x)) \sum_{k=1}^K (h_k(x) - f(x)) \right] = \\ & = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2 + \mathbb{E}(y - f(x))^2] - \\ & \quad - \frac{2}{K} \mathbb{E} [(y - f(x))(Kf(x) - Kf(x))] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2 + \mathbb{E}(y - f(x))^2] = \\
&= \mathbb{E}(y - f(x))^2 + \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2.
\end{aligned}$$

Переносим слагаемое $\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2$ в левую часть, получим:

$$\mathbb{E}(y - f(x))^2 = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K [\mathbb{E}(h_k(x) - y)^2 - \mathbb{E}(h_k(x) - f(x))^2].$$

Соответственно для уменьшения среднеквадратичной ошибки необходимо уменьшать среднеквадратичную ошибку каждого отдельного предиктора $h_k(x)$, а также увеличивать расхождение между прогнозами различных предикторов. Вдохновляясь данным разложением, в следующей главе предложим использовать для обучения градиентного бустинга функцию ошибки, которая будет очень сильно напоминать правую часть данного разложения.

3.2. Среднеквадратичная ошибка с удалением от обученного ансамбля

В модифицированном алгоритме градиентного бустинга, описанном в главе 2.2, на каждой итерации градиентного бустинга оптимизируется среднеквадратичная ошибка:

$$L(f(x) + h(x), X, Y) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (f(x_i) + h(x_i) - y_i)^2,$$

где $f(x_i)$ — предсказания обученного на текущий момент ансамбля, y_i — отклики, $h(x_i)$ — предсказания нового дерева решений (по ним происходит оптимизация функционала).

Исходя из выведенной ранее формулы 1 для повышения обобщающей способности леса деревьев решений разумно на каждом шаге оптимизировать функцию

$$(2) \quad \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T [(h(x_i) + f(x_i) - y_i)^2 - \gamma(f(x_i) - h(x_i))^2].$$

Здесь часть $\frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (h(x_i) + f(x_i) - y_i)^2$ соответствует слагаемому $\mathbb{E}(h_k(x) - y)^2$ в формуле 1 (для текущей итерации k) за тем исключением, что здесь хотим, чтобы именно сумма функций $f(x) + h(x)$ предсказывала искомый отклик y . Данное изменение было сделано в силу того, что функция $\frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (h(x_i) + f(x_i) - y_i)^2$ является среднеквадратичной функцией потерь для

алгоритма градиентного бустинга, в то время как функция $\frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (h(x_i) - y_i)^2$ соответствует процедуре обучения случайного леса. Стоит отметить, что, формально говоря, это не соответствует формуле 1, поэтому отметим, что формула 1 приводится как источник вдохновения и мотивации авторов использовать функцию потерь под формулой 2.

В данной функции есть дополнительная добавка $-\gamma(h(x_i) - f(x_i))^2$, позволяющая добиться дополнительной регуляризации за счет различия между новым обучаемым деревом и уже обученным лесом решающих деревьев. Кроме того, это соответствует разложению среднеквадратичной ошибки ансамбля по формуле 1 с одним лишь исключением — коэффициентом γ перед вторым слагаемым. Коэффициент $\gamma < 1$ необходим для существования минимума по $h(x)$ для функции 2.

Соответственно обучение деревьев будет производиться на откликах, преобразованных следующей функцией:

$$\hat{h}(\hat{x}_k^i) = \frac{\hat{y}_k^i - (1 + \gamma)f_{i-1}(\hat{x}_k^i)}{1 - \gamma}.$$

Заметим, что для $\gamma = 1$ (как в оригинальной формуле разложения ошибок) минимум не находится, поэтому используется коэффициент γ .

Кроме того, поскольку итоговое дерево $h(x)$, обученное на выходах $\hat{h}(x)$, будет добавляться с некоторым коэффициентом β_i , то, если обучать дерево на выходах $(1 - \gamma)\hat{h}(\hat{x}_k^i) = \hat{y}_k^i - (1 + \gamma)f_{i-1}(\hat{x}_k^i)$, обученное дерево на самом деле будет соответствовать $(1 - \gamma)h(x)$ и можно получить точно такой же лес, добавив полученное дерево с коэффициентом $\frac{\beta_i}{1 - \gamma}$.

3.3. Смещенная среднеквадратичная ошибка

Будем использовать $L(f(x), X, Y) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T (\alpha f(x_i) - y_i)^2$, где $\alpha \in \mathbb{R}_{++}$. В такой ситуации новые деревья решений будут обучаться на выборке, у которой отклики были преобразованы следующей функцией:

$$\hat{h}(\hat{x}_k^i) = \frac{1}{\alpha} \hat{y}_k^i - f_{i-1}(\hat{x}_k^i).$$

Заметим, что, как и в предыдущем случае, возможно обучение дерева решений на выходах $\alpha \hat{h}(\hat{x}_k^i) = \hat{y}_k^i - \alpha f_{i-1}(\hat{x}_k^i)$ и добавления дерева решений с коэффициентом $\frac{\beta_i}{\alpha}$.

Основная идея данного подхода заключается в том, чтобы добавить шума в обучаемые деревья решений, для того чтобы уменьшить корреляцию между выходами различных деревьев решений в итоговом лесу, что позволяет увеличить обобщающую способность обучаемой модели [12].

Отметим, в такой ситуации оказывается, что использование данной функции потерь с параметром $\alpha = 1 + \gamma$ абсолютно эквивалентно использованию

предыдущей модификации функции потерь. Кроме того, логично использовать только лишь $0 \leq \gamma \leq 1$, так как в случае $\gamma < 0$ будет поощряться похожесть откликов нового дерева решений на отклики всего ансамбля, в то время как было решено уменьшать корреляцию между ними, а в случае $\gamma > 1$ функция $\frac{1}{T} \sum_{i=1}^T [(h(x_i) + f(x_i) - y_i)^2 - \gamma(h(x_i) - f(x_i))^2]$ будет иметь минимум в точках $h(x_i) = \pm\infty$. В соответствии с границами изменения γ , а также выведенной зависимостью $\alpha = 1 + \gamma$ получаем, что имеет смысл рассматривать лишь $\alpha \in [1; 2]$.

4. Вычислительные эксперименты

Для проверки качества работы представленного метода будем решать различные задачи классификации и регрессии, используя обычный градиентный бустинг, сравнивая результаты работы с градиентным бустингом с использованием смещенной квадратичной ошибки¹. Кроме того, проводились вычислительные эксперименты с использованием среднеквадратичной ошибки с удалением от обученного ансамбля, но их результаты полностью совпадают с использованием обычной смещенной квадратичной ошибки, что соответствует теории.

4.1. Описание данных

4.1.1. Обнаружение аритмии. Данные² состоят из 452 записей ЭКГ. Каждая запись представлена в виде набора из 279 признаков, 206 из которых — линейные, остальные 73 являются перечислимыми. Кроме того, в признаках встречаются пропуски. В данных присутствует информация о том, какой вид аритмии присутствует у пациента, или отмечается факт, что аритмия отсутствует [13]. По этим данным строится дополнительный признак — «наличие аритмии», который равен 0, если аритмия отсутствует, или 1 при наличии любого вида аритмии. Ставится задача классификации по целевому бинарному признаку «наличие аритмии». Целевой метрикой качества является ROC AUC.

4.1.2. Таяние ледников в Арктике. Данные³ состоят из 170 записей о ледниках в Арктике. Необходимо предсказать, растаял ли ледник или нет, имея информацию о 96 параметрах исследуемого ледника. Целевая метрика качества — ROC AUC.

4.1.3. Предсказание продаж. Данные состоят из 869 записей о количестве продаж некоторого товара вместе с описанием товара. Описание состоит из 286 бинарных признаков и двух линейных численных признаков. Решается задача регрессии по целевому признаку «количество продаж». Целевой метрикой качества является коэффициент детерминации R^2 .

¹ https://drive.google.com/file/d/1EyiNNQ_u0CzQ7qYEdZEeEwFTwjkkv2xL/view

² <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Arrhythmia>

³ <https://drive.google.com/file/d/1ADa975pas6WpM5SDmPCRF4oPrAyoBkx4/view?usp=sharing>

4.1.4. Предсказание систолического давления. Данные представляют из себя 837 записей о 160 параметрах пациентов. Ставится задача регрессии по целевому признаку «систолическое давление» выборки. Целевой метрикой качества является коэффициент детерминации R^2 .

4.2. Процедура обучения

Каждая из выборок данных делится на три подвыборки: обучающую, проверочную и тестовую в соотношении 65%/10%/25% соответственно. Затем обучение разбивается на два этапа:

- 1) поиск гиперпараметра α ,
- 2) проверка эффективности обучения модели.

4.2.1. Поиск гиперпараметра α . На каждом наборе данных производится поиск гиперпараметра α в модели градиентного бустинга со среднеквадратичной ошибкой. Для этого производится обучение нескольких моделей на обучающей выборке с различными значениями гиперпараметра α . Затем качество каждой модели проверяется на проверочной выборке. Параметр, соответствующий модели с наилучшим качеством на данной выборке, используется для следующего этапа обучения.

4.2.2. Проверка эффективности обучения модели. На этом этапе обучающая и проверочная выборки по каждому из наборов данных объединяются, и на соответствующей выборке производится обучение всех последующих моделей.

Модель градиентного бустинга со смещенной среднеквадратичной ошибкой обучается на полученном наборе данных с параметром α , выведенным с предыдущего этапа, затем качество модели оценивается на тестовой части выборки. Аналогичная процедура обучения производится с моделью обычного градиентного бустинга.

4.3. Результаты экспериментов

Наиболее хороших результатов на различных задачах удалось достичь для $\alpha = 1,1$. Использование модифицированной функции потерь позволило улучшить предсказательную способность градиентного бустинга как на задачах классификации, так и на задачах регрессии.

Целевая метрика на тестовой выборке для лесов, обученных стандартной процедурой градиентного бустинга (столбец «Среднеkv. ошибка») и с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки (столбец «Смещенная среднеkv. ошибка»)

Набор данных	Среднеkv. ошибка	Смещенная среднеkv. ошибка	Параметр α
Аритмия	0,89 (ROC AUC)	0,90 (ROC AUC)	1,7
Ледники	0,72 (ROC AUC)	0,75 (ROC AUC)	1,1
Продажи	0,21 (R^2)	0,26 (R^2)	1,1
Сист. давл.	0,41 (R^2)	0,46 (R^2)	1,1

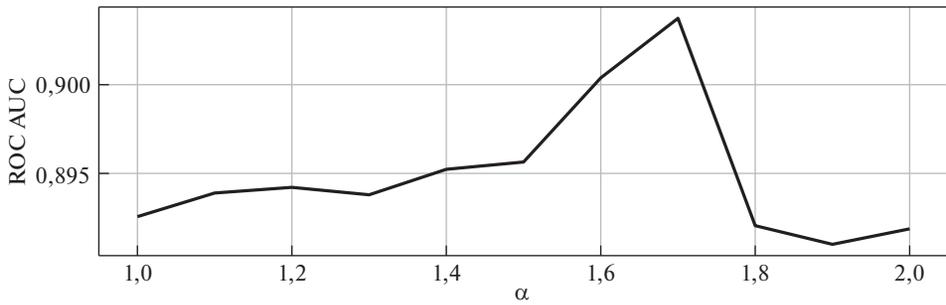


Рис. 1. ROC AUC при обучении классификатора с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки для различных параметров α в задаче предсказания аритмии.

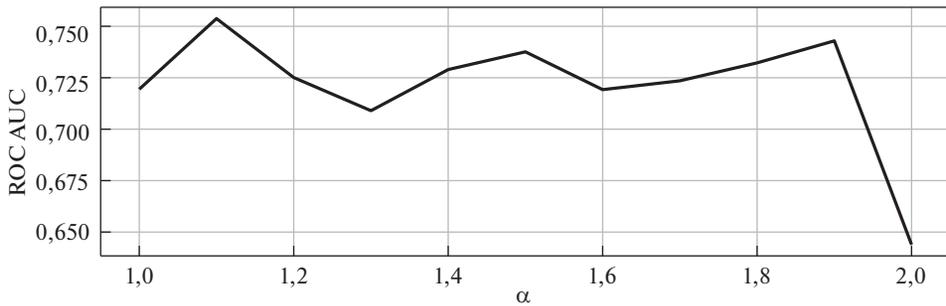


Рис. 2. ROC AUC при обучении классификатора с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки для различных параметров α в задаче предсказания таяния ледников.

Итоговые результаты экспериментов представлены в таблице.

Помимо этого приведем графики качества в зависимости от параметра α для каждой задачи (рис. 1–4).

4.4. Анализ полученных результатов

Полученные результаты показывают, что использование модифицированных функций потерь в процедуре обучения решающего дерева при помощи градиентного бустинга способно достаточно серьезно увеличивать обобщающую способность предсказания в сравнении с обычной процедурой обучения градиентного бустинга.

На графиках зависимости качества модели от параметра α явно видно, что при больших значениях параметра α алгоритм имеет слишком низкую обобщающую способность и начинает терять в качестве, помимо этого в трех из четырех задачах наилучшим выбором коэффициента α было 1,1, поэтому считаем, что именно таким стоит выбирать значения гиперпараметра α .

Кроме того, наблюдается эффект недообучения при использовании модифицированных функций потерь в случае, когда объектов достаточно много.

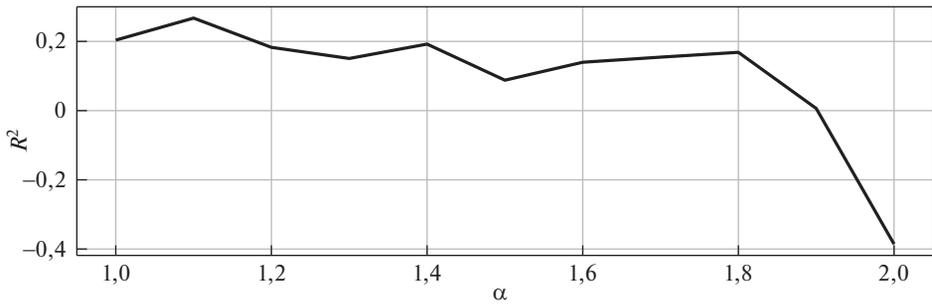


Рис. 3. R^2 при обучении регрессора с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки для различных параметров α в задаче предсказания продаж.

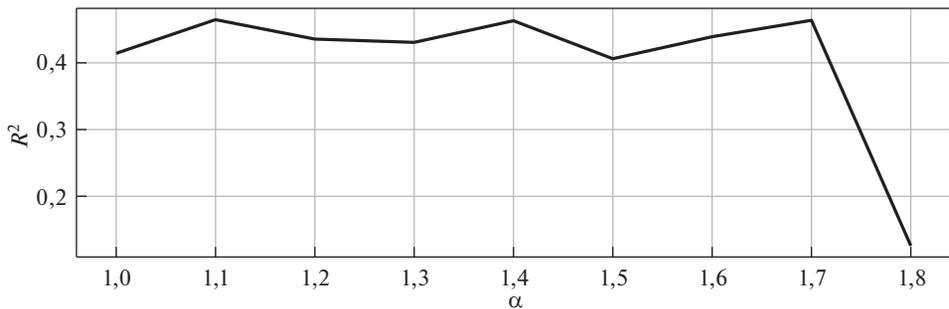


Рис. 4. R^2 при обучении регрессора с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки для различных параметров α в задаче предсказания систолического давления.

В такой ситуации применялась смешанная стратегия обучения — первая половина итераций обучалась с использованием смещенной среднеквадратичной ошибки, а вторая половина обучалась в соответствии со стандартным алгоритмом градиентного бустинга.

5. Заключение

В процессе выполнения работы были получены следующие результаты.

- Разработан метод повышения эффективности обучения градиентного бустинга, основанный на использовании модифицированных функций потерь.
- Получено теоретическое доказательство эквивалентности метода, использующего смещенную среднеквадратичную ошибку, и метода, использующего среднеквадратичную ошибку с удалением от обученного ансамбля.
- Проведены вычислительные эксперименты, которые показали возможную применимость данного метода для улучшения обобщающей способности лесов решений, построенных алгоритмом градиентного бустинга, на различных реальных задачах регрессии и классификации.

— Выявлено значение параметра $\alpha = 1,1$ в смещенной среднеквадратичной ошибке, при котором достигается наиболее стабильный эффект прироста качества работы модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Friedman Jerome H.* Multiple Additive Regression Trees with Application in Epidemiology // *Statist. in Medicine*. 2003. V. 22. No. 9. P. 1365–1381.
2. *Elith J.* Boosted Regression Trees for ecological modeling // *CRAN*. 2018. V. 77(4). P. 802–813.
3. *Lalchand V.* Extracting more from boosted decision trees: A high energy physics case study // *arXiv:2001.06033*. 2020.
4. *Breiman L.* Random forests // *Machine Learning*. 2001. V. 45. No. 1.
5. *Zhi-Hua Z.* Ensemble Methods: Foundations and Algorithms // *Chapman and Hall/CRC*. 2012.
6. *Журавлев Ю.И., Сенько О.В., Докукин А.А., Киселева Н.Н., Саенко И.А.* Двухуровневый метод регрессионного анализа, использующий ансамбли деревьев с оптимальной дивергенцией // *ДАН. Математика, информатика, процессы управления*. 2021. Т. 499. № 1. С. 63–66.
7. *Friedman Jerome H.* Stochastic gradient boosting // *Comput. Statist. & Data Anal.* 2002. V. 38. No. 4. P. 367–378.
8. *Prokhorenkova L., Gusev G., Vorobev A., Dorogush A.V., Gulin A.* CatBoost: unbiased boosting with categorical features // *arXiv:1706.09516*. 2017.
9. *Chen T., Guestrin C.* XGBoost: A Scalable Tree Boosting System // *arXiv:1603.02754*. 2016.
10. *Ke G. et al.* LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017. V.30. P. 3146–3154.
11. *Gavin Brown, Jeremy Wyatt, Rachel Harris, Xin Yao* Diversity creation methods: A survey and categorisation // *Information Fusion*. 2005. V. 6. P. 367–378.
12. *Докукин А.А., Сенько О.В.* Оптимальные выпуклые корректирующие процедуры в задачах высокой размерности // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2011. Т. 51. С. 1751–1760.
13. *Guwenir H. Altay, Acar B., Muderrisoglu H.* Arrhythmia Data Set // <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Arrhythmia>

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 31.01.2022

После доработки 21.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. В.Б. БЕРИКОВ, д-р техн. наук (berikov@math.nsc.ru)
(Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Новосибирск;
Новосибирский государственный университет)

МОДЕЛЬ И МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ РАЗНОРОДНОГО КЛАСТЕРНОГО АНСАМБЛЯ¹

Рассматривается задача кластеризации данных с помощью разнородного ансамбля с использованием матрицы коассоциации. Формулируется вероятностная модель, учитывающая коррелированность оценочных функций, с помощью которой находятся соотношения между характеристиками ансамбля и показателями качества итогового решения. Найдено выражение для оптимальных весов базовых алгоритмов, для которых минимальна верхняя граница оценки вероятности ошибки кластеризации. Проведено экспериментальное исследование предложенного метода, показавшее его преимущество по сравнению с рядом аналогичных методов.

Ключевые слова: кластерный анализ, ансамбль алгоритмов, коассоциативная матрица, модель кластерного ансамбля, оптимальные веса алгоритмов.

DOI: 10.31857/S000523102212008X, EDN: KSWKSX

1. Введение

В кластерном анализе требуется получить разбиение некоторого множества объектов на относительно небольшое число однородных подмножеств (групп, кластеров, классов). Число групп может быть известно заранее или должно быть определено автоматически. В данной работе рассматривается случай, когда требуемое число групп задано пользователем. Под критерием однородности разбиения понимается некоторый функционал, зависящий от описаний объектов, например показателей внутригруппового и межгруппового разброса.

Существует большое число методов кластерного анализа [1–4]. На практике чаще всего применяются приближенные итеративные алгоритмы, работа которых управляется с помощью некоторых параметров.

В настоящее время существует необходимость в создании новых методов, которые позволяли бы обнаруживать кластеры сложной формы и получать устойчивые результаты вне зависимости от начальных инициализаций алгоритма, порядка рассмотрения объектов и наличия шумовых искажений в данных.

¹ Работа проведена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-21-00261.

В задачах классификации и прогнозирования активно развивается подход, основанный на коллективном принятии решений [5–9]. При этом итоговое решение определяется на основе нескольких вариантов разбиений, полученных различными алгоритмами либо одним алгоритмом, с разными параметрами работы. Коллективный (ансамблевый) подход позволяет повышать устойчивость результатов группировки в случае неопределенности в выборе параметров, проводить обработку больших объемов данных (анализируя по отдельности сравнительно небольшие их части), а также использовать «простые» вычислительно эффективные алгоритмы (например, направленные на поиск кластеров сферической формы) для обнаружения сложных структур данных [10].

Существует несколько основных направлений в методах построения коллективных решений кластерного анализа [11]. В данной работе рассматривается направление, основанное на использовании *коассоциативных матриц* (называемых также *матрицами попарных совпадений*, *матрицами смежности*, *co-occurrence matrix*), устанавливающих, как часто каждая пара объектов оказывается в одном и том же кластере (или в различных кластерах) по всем вариантам разбиения. Использование такого вида матриц позволяет решить проблему взаимного соответствия кластеров в вариантах группировки: поскольку нумерация кластеров внутри каждой кластеризации является субъективной, любые перестановки меток кластеров эквивалентны (проблема подробно рассматривается в [6], где предложен один из первых алгоритмов построения кластерного ансамбля).

Элементы усредненной матрицы могут рассматриваться как меры попарного расстояния (сходства) между объектами: чем чаще пара объектов была объединена алгоритмами, входящими в ансамбль, в один кластер, тем более похожими являются данные объекты. Для получения итогового консенсусного разбиения используется какой-либо из алгоритмов кластерного анализа, основанный на попарном сходстве, например, агломеративный алгоритм построения иерархической группировки.

Вероятностное обоснование данного подхода (доказательство сходимости ансамблевых решений к «истинному» разбиению) было сделано в [12]. В [13] представлена вероятностная модель коллективного кластерного анализа, позволяющая свести задачу кластеризации к задаче попарной классификации с латентными классами. При этом учитываются веса различных базовых алгоритмов ансамбля. Сформулирован критерий оптимальности весов и предложен метод их нахождения. В настоящей работе проводится дальнейшее развитие данного подхода. Проводится исследование влияния коррелированности базовых решений ансамбля на его качество. Показано, что учет коррелированности позволяет объяснить улучшение качества ансамбля при увеличении степени разнообразия вариантов разбиения, что ранее было экспериментально установлено в ряде работ (см., например, [14–16]).

Работа имеет следующую структуру. В первом разделе даны основные понятия работы. Во втором разделе вводится вероятностная модель ансамблевого кластерного анализа, в рамках которой исследуются свойства ансамбля. В третьем разделе описывается методика выбора оптимальных весов базовых алгоритмов ансамбля. Четвертый раздел посвящен вычислительному эксперименту с алгоритмом. В Заключении подводятся итоги работы и намечаются перспективы дальнейших исследований.

2. Основные понятия и обозначения

Пусть информация о множестве объектов исследования $A = \{a_1, \dots, a_N\}$ представлена в виде набора $\mathbf{X} = \{x_1, \dots, x_N\}$, где $x_i = X(a_i) = (X_1(a_i), \dots, X_d(a_i))$ — вектор признаков для объекта $a_i \in A$, $i = 1, \dots, N$, d — размерность пространства признаков, $x_i \in \mathbf{R}^d$. Требуется разбить множество A на некоторое заданное число кластеров K .

В ансамблевом кластерном анализе рассматривается набор базовых алгоритмов группировки μ_1, \dots, μ_M , которые строят варианты разбиения множества A . Каждый вариант состоит из $K_{l,m}$ непересекающихся подмножеств (кластеров), $m = 1, \dots, M$, $l = 1, \dots, L_m$, где L_m — число запусков алгоритма μ_m (величина $K_{l,m}$ может не совпадать с итоговым числом кластеров K). Варианты разбиения получены при различных значениях параметров работы (или, в более общем смысле, «условий обучения», таких как подмножество отобранных переменных или набор начальных центроидов). Обозначим множество возможных значений параметров алгоритма μ_m через Ω_m .

Определим для каждой пары различных объектов a_i и a_j из множества A величину

$$h(\Omega_{l,m}; i, j, \mathbf{X}) = \mathbf{I}[\mu_m(a_i, \Omega_{l,m}, \mathbf{X}) = \mu_m(a_j, \Omega_{l,m}, \mathbf{X})],$$

где $\mathbf{I}[\cdot]$ — индикаторная функция: $\mathbf{I}[true] = 1$; $\mathbf{I}[false] = 0$, $\mu_m(a, \Omega_{l,m}, \mathbf{X})$ — номер кластера, приписанного объекту $a \in A$ согласно l -му варианту разбиения, сформированного алгоритмом μ_m для набора параметров $\Omega_{l,m} \in \Omega_m$ по набору данных \mathbf{X} . При заданных $\Omega_{l,m}$, \mathbf{X} будем записывать: $h_{l,m}(i, j) = h(\Omega_{l,m}; i, j, \mathbf{X})$. Для каждого l -го варианта разбиения можно определить коассоциативную матрицу $\mathbf{H}_l = (h_l(i, j))$.

Коллективная кластеризация в рамках рассматриваемого подхода полагается как процесс, включающий несколько основных этапов.

На **первом этапе** формируются различные варианты разбиения выборки $P_{1,1}, \dots, P_{l,m}, \dots, P_{L_m,M}$, полученные на основе случайного независимого выбора параметров алгоритмов из множеств $\Omega_1, \dots, \Omega_M$ в соответствии с некоторыми распределениями (например, равномерными).

На **втором этапе** проводится анализ полученных разбиений: определяются оценочные функции $\gamma_{l,m} \geq 0$, которые зависят от индексов качества полученных вариантов, мер их разнообразия и т.п. и в общем случае являются функциями от разбиений: $\gamma_{l,m} = \gamma_{l,m}(P_{1,1}, \dots, P_{L_m,M})$. Будем считать, что

чем выше показатели качества вариантов, тем большее значение принимает величина оценочной функции.

Например, при применении процедуры селекции ансамбля [16] проводится вычисление мер разнообразия разбиений и тем вариантам, для которых эта мера не превышает определенный порог, присваивается нулевое значение оценочной функции. Оставшимся вариантам приписывается некоторое ненулевое постоянное значение.

На **третьем этапе** вычисляется усредненная с весами коассоциативная матрица $\mathbf{H} = (h(i, j))$ с элементами

$$(1) \quad h(i, j) = \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^{L_m} \gamma_{l,m} h_{l,m}(i, j),$$

$(i, j = 1, \dots, N, i \neq j)$. Элементы \mathbf{H} рассматриваются как меры близости между парами соответствующих объектов. Для формирования окончательного разбиения на заданное число кластеров можно применять любой алгоритм, который использует матрицу \mathbf{H} как исходную информацию для группирования. В данной работе с этой целью используется алгоритм, основанный на спектральном кластерном анализе [17]. В итоге получим разбиение множества A на подмножества C_1, \dots, C_K .

В целях управления качеством ансамбля целесообразно ввести управляемую компоненту в (1) и представить элементы усредненной коассоциативной матрицы в виде

$$(2) \quad h(i, j) = \sum_{m=1}^M \alpha_m \sum_{l=1}^{L_m} \gamma_{l,m} h_{l,m}(i, j),$$

где $\alpha_1, \dots, \alpha_M$ — веса базовых алгоритмов μ_1, \dots, μ_M , $\sum \alpha_m = 1$, $\alpha_m \geq 0$. Веса могут назначаться пользователем в соответствии с характеристиками ансамбля. Данная возможность будет рассмотрена ниже в разделе 4.

3. Вероятностная модель ансамблевой классификации

Описывается модель коллективной классификации с латентными классами, в рамках которой по наблюдаемым характеристикам ансамбля оценивается вероятность непосредственно не наблюдаемой ошибки классификации.

3.1. Модель генерации данных и ансамбля алгоритмов

При формулировании модели будем использовать основные положения работы [13]. Сформулируем следующую модель генерации данных. Пусть объекты множества A случайным и независимым образом выбираются из некоторой генеральной совокупности Γ , разделенной на K классов. Предположим, что в описании произвольного объекта $a \in \Gamma$ имеется признак Y , который указывает на его принадлежность к определенному классу: $Y(a) \in \{1, \dots, K\}$.

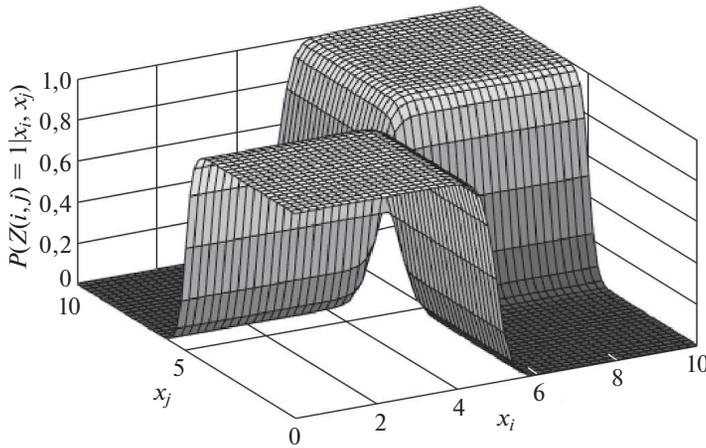


График функции $P[Z(i, j) = 1 | x_i, x_j]$ в зависимости от значений x_i, x_j .

Этот признак является скрытым (непосредственно не наблюдаемым) для алгоритма кластеризации. Каждому классу соответствует априорная вероятность $P_k = P(Y(a) = k)$, $k = 1, \dots, K$, где $\sum_{k=1}^K P_k = 1$. Классу с номером k сопоставляется закон условного распределения в пространстве признаков: $p(X(a) = x | Y(a) = k) = p_k(x)$, $k = 1, \dots, K$.

Для произвольной пары различных объектов $a_i, a_j \in A$ определим случайную величину

$$Z(i, j) = \mathbf{I}[Y(a_i) = Y(a_j)],$$

которая показывает действительный статус пары, т.е. принадлежит ли она к одному классу или к разным классам. Пусть набор данных \mathbf{X} фиксирован; при этом источником случайности в модели служит выбор параметров алгоритма кластеризации, а также истинный статус пар объектов. Распределение величины $Z(i, j)$ при условии заданных значений $X(a_i) = x_i$ и $X(a_j) = x_j$ определяется через условное распределение $P[Y | X(a) = x]$, $a \in A$:

$$\begin{aligned} P[Z(i, j) = 1 | x_i, x_j] &= \sum_{k=1}^K P[Y(a_i) = k | x_i] P[Y(a_j) = k | x_j] = \\ &= \sum_{k=1}^K \frac{p_k(x_i)p_k(x_j)P_k^2}{p(x_i)p(x_j)}, \end{aligned}$$

где $p(x) = \sum_{k=1}^K p_k(x)P_k$. На рисунке показан пример графика функции $P[Z(i, j) = 1 | x_i, x_j]$ для случая двух классов, подчиняющихся одномерным нормальным распределениям: $x_i \sim N(2, 1)$, $x_j \sim N(8, 1)$ и равными априорными вероятностями.

Обозначим через Ω_m случайный набор параметров, выбираемый из $\mathbf{\Omega}_m$. Предположим, что алгоритм μ_m проработал некоторое число L_m раз при независимо выбранных, в соответствии с одним и тем же распределением, параметрах. Тогда величины $\Omega_{m,1}, \dots, \Omega_{m,L_m}$ являются независимыми и одинаково распределены с Ω_m .

Предполагается, что все требования, необходимые для корректной работы базовых алгоритмов (например, относящиеся к свойствам меры близости между парами объектов), соблюдены.

Результаты работы алгоритма μ_m (т.е. полученные элементы матрицы коассоциации) можно рассматривать как детерминированные функции $h_{l,m}(i, j) = h(i, j, \Omega_{l,m}, \mathbf{X})$ от независимых многомерных случайных величин $\Omega_{l,m} \in \mathbf{\Omega}_m$, $l = 1, \dots, L_m$, которые подчиняются одному и тому же распределению на $\mathbf{\Omega}_m$. Обозначим: $\Psi = \{\Omega_{1,1}, \dots, \Omega_{L_M,M}\}$.

Рассмотрим условные вероятности правильного решения для каждого алгоритма (объединения пары объектов из одного класса в один кластер или разделения пары из разных классов в различные кластеры):

$$q_m^{(1)}(i, j, \mathbf{X}) = \text{P} [h(i, j, \Omega_m, \mathbf{X}) = 1 \mid Z(i, j) = 1],$$

$$q_m^{(0)}(i, j, \mathbf{X}) = \text{P} [h(i, j, \Omega_m, \mathbf{X}) = 0 \mid Z(i, j) = 0].$$

В результате работы алгоритма получим набор независимых случайных величин — решений

$$h(i, j, \Omega_{1,m}, \mathbf{X}), \dots, h(i, j, \Omega_{L_m,m}, \mathbf{X}), \quad m = 1, \dots, M.$$

Будем также считать, что решения условно независимы:

$$\begin{aligned} \text{P} [h(i, j, \Omega_{i_1,m_1}, \mathbf{X}) = h_{r_1}, \dots, h(i, j, \Omega_{i_j,m_j}, \mathbf{X}) = h_{r_j} \mid Z(i, j) = z] = \\ = \text{P} [h(i, j, \Omega_{i_1,m_1}, \mathbf{X}) = h_{r_1} \mid Z(i, j) = z] \times \dots \times \\ \times \text{P} [h(i, j, \Omega_{i_j,m_j}, \mathbf{X}) = h_{r_j} \mid Z(i, j) = z], \end{aligned}$$

где $\Omega_{i_1,m_1}, \dots, \Omega_{i_j,m_j}$ — произвольные параметры; индексы m_1, \dots, m_j соответствуют разным сочетаниям алгоритмов, h_{r_1}, \dots, h_{r_j} , $z \in \{0, 1\}$.

Величина оценочной функции $\gamma_{l,m}$, определяемая на втором этапе построения ансамбля, зависит от полного набора результатов группировки $P_{1,1}, \dots, P_{L_M,M}$. Необходимость учета других вариантов, помимо текущего, может быть обоснована, например, тем, что при наличии совпадающих или очень похожих вариантов их вес было бы разумно уменьшить. Часть дублирующих разбиений можно исключить, что эквивалентно обнулению их весов. Так как результаты группировки, в свою очередь, определяются выбором параметров работы алгоритмов, то можно считать, что оценочная функция зависит от всего набора параметров: $\gamma_{l,m} = \gamma_{l,m}(\Psi, \mathbf{X})$. Поскольку функционал

качества определяется по всему набору данных, можно полагать, что он практически не зависит от любых других величин, определенных для конкретной пары объектов. То есть будем считать, что величины $\gamma_{l,m} = \gamma_{l,m}(\Psi, \mathbf{X})$ и $h_{l,m}(i, j) = h(i, j, \Omega_{l,m}, \mathbf{X})$ некоррелированы.

Можно полагать, что для каждого базового алгоритма μ_m , $m = 1, \dots, M$, оценка различных вариантов его работы проводится по одинаковой схеме; тогда распределение величин $\gamma_{l,m} = \gamma_{l,m}(\Psi, \mathbf{X})$, $l = 1, \dots, L_m$ будет одинаково.

3.2. Характеристики ансамбля

Для того чтобы использовать модель ансамблевой классификации для управления качеством коллективного решения, необходимо найти зависимость между наблюдаемыми характеристиками работы ансамбля и показателями качества коллективной классификации.

3.2.1. Вероятность ошибки ансамблевой классификации

Введем предварительно следующие понятия. Для фиксированной пары различных индексов $i, j \in \{1, \dots, N\}$, ансамблевым решением, полученным для усредненной матрицы коассоциации с элементами, вычисляемыми согласно (2), назовем величину

$$D(i, j, \Psi, \mathbf{X}) = \mathbf{I} \left[\sum_{l,m:h_{l,m}(i,j)=1} \gamma_{l,m} > \sum_{l,m:h_{l,m}(i,j)=0} \gamma_{l,m} \right].$$

Величина $D(i, j, \Psi, \mathbf{X}) \in \{0, 1\}$ и показывает, превышает ли суммарный вес голосов за объединение пары в один кластер (когда $D(i, j, \Psi, \mathbf{X}) = 1$) сумму голосов за ее разделение (при $D(i, j, \Psi, \mathbf{X}) = 0$). Ансамблевое решение зависит от набора случайных параметров алгоритма, а также от исходного множества данных.

Вероятность ошибки ансамблевой классификации для пары определяется как

$$(3) \quad P_{er}(i, j; \mathbf{X}) = P_{\Psi, Z(i,j)} [D(i, j, \Psi, \mathbf{X}) \neq Z(i, j)].$$

Здесь индексы $\Psi, Z(i, j)$ обозначают источник случайности.

3.2.2. Разложение ошибки на составляющие

В данном подразделе, для краткости, будем опускать индексы i, j и обозначение \mathbf{X} в величинах, определенных выше (подразумевая, что соответствующие значения i, j, \mathbf{X} фиксированы). Пусть $D = D(\Psi)$.

Выражение для вероятности ансамблевой ошибки классификации (3) можно представить в следующем виде: $P_{er} = E_{\Psi, Z}[Z - D]^2 = \text{Var}[Z - D] + (E[Z - D])^2$. Так как $\text{Var}[Z - D] = \text{Var}[Z] + \text{Var}[D] - 2\text{Cov}[Z, D]$, то

$$(4) \quad P_{er} = \text{Var}[Z] + \text{Var}[D] + (E[Z - D])^2 - 2\text{Cov}[Z, D].$$

Здесь через $\text{Var}[\cdot]$ и $\text{Cov}[\cdot, \cdot]$ обозначены соответственно дисперсия и ковариация случайных величин. Полученное выражение (4) можно проинтерпретировать следующим образом. Ошибка классификации для пары объектов имеет несколько источников возникновения:

- неустраняемая ошибка $\text{Var}[Z]$, которая связана с близостью или пересечением истинных непосредственно не наблюдаемых классов;
- разброс ансамблевых решений $\text{Var}[D]$;
- несоответствие между истинным статусом пары объектов и решением ансамбля, выражаемое через квадрат смещения: $(E[Z - D])^2$;
- ковариация с обратным знаком $\text{Cov}[Z, D]$ между истинным статусом и решением ансамбля.

Можно заметить, что в «простых» задачах кластеризации, т.е. при высокой степени делимости классов (например, когда дисперсия $\text{Var}[Z]$ мала для всех пар объектов) и достаточно точном соответствии решений ансамбля истинному статусу, малое значение вероятности ошибки в (4) достигается при небольшом разнообразии ансамбля (малом разбросе решений, т.е. величины D для пары).

Однако в случае трудноразделимых классов, когда вариабельность Z велика, для уменьшения смещения и увеличения ковариации требуется увеличивать разнообразие ансамбля. Например, в идеальном случае, когда $P[Z = D] = 1$ (когда алгоритм построения ансамбля точно определяет истинный статус пар объектов), смещение будет нулевым, ковариация максимальной, а дисперсия решений (совпадающая с дисперсией Z) также большой.

Соотношение (4) позволяет на качественном уровне судить об источниках возникновения ошибки ансамбля. С использованием рассматриваемого ниже понятия маржинальной функции можно получить более детальные выводы относительно поведения ансамбля.

3.2.3. Основные характеристики маржинальной функции

Рассмотрим усредненную коассоциативную матрицу в виде (2). Оценкой решения (маржинальной функцией кластерного ансамбля [13]) назовем величину

$$(5) \quad mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X}) = \sum_{l, m: h_{l, m}(i, j) = Z(i, j)} \alpha_m \gamma_{l, m} - \sum_{l, m: h_{l, m}(i, j) \neq Z(i, j)} \alpha_m \gamma_{l, m},$$

где $Z(i, j) \in \{0, 1\}$ — истинный статус пары. Эта функция показывает, насколько взвешенное число голосов за правильное решение превосходит взвешенное число голосов за неправильное решение, и зависит от параметров алгоритмов, истинного статуса пары и от выборки.

С использованием маржинальной функции можно представить условную вероятность ошибки предсказания величины Z для пары объектов в следую-

щем виде:

$$P_{err}(i, j, z) = P [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X}) < 0 \mid Z(i, j) = z].$$

Переход к условной вероятности обусловлен более простым видом получаемых выражений. Чтобы определить свойства данной величины, необходимо знать характеристики маргинальной функции. Найдем ее первые условные моменты.

Утверждение 1. Условное математическое ожидание маргинальной функции равно

$$(6) \quad E_{\Psi|z}[mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})] = \sum_m \alpha_m L_m \Gamma_m \left(2q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) - 1 \right),$$

а ее условная дисперсия —

$$(7) \quad \begin{aligned} \text{Var}_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] &= \sum_m \alpha_m^2 L_m \left[V_m + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X})(1 - q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X})) \right] + \\ &+ \sum_m \alpha_m^2 L_m (L_m - 1) \left(2q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) - 1 \right)^2 C_m + \\ &+ \sum_{\substack{m, m': \\ m \neq m'}} \alpha_m \alpha_{m'} L_m L_{m'} \left(2q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) - 1 \right) \left(2q_{m'}^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) - 1 \right) C_{m, m'}, \end{aligned}$$

где оператор $E_{X|z}[\cdot] = E_X[\cdot \mid Z = z]$ обозначает условное математическое ожидание, $\Gamma_m = E_{\Psi}[\gamma_{l,m}]$ есть математическое ожидание оценочного функционала на множестве Ω_m , $V_m = \text{Var}_{\Psi}[\gamma_{l,m}]$ обозначает дисперсию оценочной функции, $C_m = \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m}]$ — ковариация между оценочными функциями для алгоритма μ_m , $C_{m,m'} = \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m'}]$ — ковариация между оценочными функциями для различных алгоритмов $\mu_m, \mu_{m'}$ ($m \neq m', m, m' = 1, \dots, M$).

Доказательство утверждения 1 приведено в Приложении.

3.2.4. Влияние характеристик ансамбля на вероятность ошибки

Известно, что для любой случайной величины U с конечным математическим ожиданием $E[U] > 0$ и дисперсией $\text{Var}[U]$ справедливо

$$P[U < 0] \leq P[\{U < E[U] - \varepsilon\} \cup \{U > E[U] + \varepsilon\}] = P[|U - E[U]| > \varepsilon],$$

где $\varepsilon = E[U]$. Из неравенства Чебышева вытекает, что

$$P[U < 0] < \frac{\text{Var}[U]}{(E[U])^2}.$$

Следовательно, для условной вероятности ошибки

$$P_{err}(i, j, z) = P [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X}) < 0 \mid Z(i, j) = z]$$

выполняется

$$(8) \quad P_{err}(i, j, z) < \frac{\text{Var}_{\Psi|z} [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})]}{(E_{\Psi|z} [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})])^2}$$

в случае, когда $E_{\Psi|z} [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})] > 0$. Из утверждения 1 следует, что данное условие будет выполнено, в частности, если для всех $m = 1, \dots, M$ справедливо

$$(9) \quad 0,5 + \varepsilon < q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) \leq 1,$$

т.е. алгоритм кластеризации принимает решение не наугад (здесь ε — некоторая малая положительная величина).

Для уменьшения вероятности ошибки можно дополнительно к (8) и (9) потребовать, чтобы дисперсия маржинальной функции (7) была бы минимальной. На основании утверждения 1 можно сделать несколько качественных выводов о поведении ансамблевых решений.

1) При прочих равных условиях верхняя граница вероятности ошибки снижается при уменьшении ковариации оценочных функций C_m и $C_{m,m'}$ для алгоритмов $\mu_m, \mu_{m'}, m, m' = 1, \dots, M$. Заметим, что уменьшение ковариации соответствует повышению степени рассогласованности оценочных функций (высокой степени разнообразия результатов группировки).

2) Предположим, что $L_1 = \dots = L_M = L$, все оценочные функции совпадают и равны $\gamma_{l,m} \equiv 1/L$, $\alpha_m \equiv 1/M$. Значит, $\forall m, \Gamma_m = 1/L$, $V_m = C_m = 0$ и $\forall m, m' (m \neq m'), C_{m,m'} = 0$. Из (6) получим:

$$E_{\Psi|z} [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})] = \frac{1}{M} \sum_m \left(2q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) - 1 \right),$$

а из (7) —

$$\text{Var}_{\Psi|z} [mg(i, j, \Psi, Z(i, j), \mathbf{X})] = \frac{4}{M^2 L} \sum_m q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) \left(1 - q_m^{(z)}(i, j, \mathbf{X}) \right).$$

На основании (8), (9) можно сделать вывод о том, что $P_{err}(i, j, z) \rightarrow 0$ при $L \rightarrow \infty$ и $M = \text{const}$. То есть при выполнении условий модели и увеличении количества элементов ансамбля вероятность ошибки стремится к нулю.

3) Предположим, что ожидаемая оценка качества Γ_m для некоторого значения m увеличивается при условии максимальной степени устойчивости $q_m^{(z)} = 1$ и при прочих неизменных характеристиках ансамбля. При этом верхняя граница вероятности ошибки будет уменьшаться. Однако при низких значениях вероятности правильного решения $q_m^{(z)}$ дисперсия маржинальной функции увеличится за счет первой группы слагаемых в (7). Таким образом, «переоценка» ансамбля может привести к ухудшению его качества.

4. Выбор оптимальных весов

4.1. Решение оптимизационной задачи

Рассмотрим задачу выбора весов $\alpha_1, \dots, \alpha_M$ базовых алгоритмов так, чтобы минимизировать верхнюю границу вероятности ошибки. Пусть выбрана произвольная пара различных объектов $a_i, a_j \in A$, таких что выполняется условие (9), тогда из (8) получим следующую задачу минимизации (индексы i, j и обозначение \mathbf{X} для краткости опущены):

$$\frac{\text{Var}_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)]}{(E_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)])^2} \rightarrow \min_{\alpha_1, \dots, \alpha_M}$$

при ограничениях $\sum \alpha_m = 1, \alpha_m \geq 0, m = 1, \dots, M$.

Приближенное численное решение можно получить, например, с помощью градиентного метода. В данной работе рассматривается упрощенная задача, при решении которой удастся вывести ответ в аналитической форме:

$$\text{Var}_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] \rightarrow \min_{\alpha_1, \dots, \alpha_M}$$

при тех же ограничениях. Для ее решения используем метод множителей Лагранжа. Пусть функция Лагранжа следующая:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} = & \sum_m \alpha_m^2 L_m \left[V_m + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)} \right) \right] + \\ & + \sum_m \alpha_m^2 L_m (L_m - 1) \left(2q_m^{(z)} - 1 \right)^2 C_m + \\ & + \sum_{\substack{m, m': \\ m \neq m'}} \alpha_m \alpha_{m'} L_m L_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1 \right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1 \right) C_{m, m'} - \lambda \left(\sum \alpha_m - 1 \right), \end{aligned}$$

где λ — множитель Лагранжа. Тогда необходимое условие экстремума будет

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \alpha_m} = & 2\alpha_m L_m \left[V_m + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)} \right) + (L_m - 1) \left(2q_m^{(z)} - 1 \right)^2 C_m \right] + \\ & + \sum_{\substack{m': \\ m \neq m'}} \alpha_{m'} L_m L_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1 \right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1 \right) C_{m, m'} - \lambda = 0, \end{aligned}$$

$m = 1, \dots, M$. Для удобства введем матричные обозначения: пусть $\mathbf{A}_{M \times M} = (A(m', m''))$ — матрица с элементами

$$(10) \quad \begin{aligned} & A(m', m'') = \\ = & \begin{cases} 2L_m \left[V_m + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)} \right) + (L_m - 1) \left(2q_m^{(z)} - 1 \right)^2 C_m \right], & m' = m'', \\ L_m L_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1 \right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1 \right) C_{m, m'}, & m' \neq m''. \end{cases} \end{aligned}$$

Получим систему линейных уравнений в виде

$$A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda \\ \vdots \\ \lambda \end{pmatrix}.$$

Добавив условие $\sum \alpha_m = 1$, запишем систему в матричной форме:

$$\mathbf{C}a = b,$$

где

$$a = (\alpha_1, \dots, \alpha_M, \lambda)^T, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} & & & -1 \\ & \mathbf{A} & & \vdots \\ & & & -1 \\ 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = (0, \dots, 0, 1)^T.$$

Тогда решение определяется как

$$(11) \quad a = \mathbf{C}^{-1}b,$$

если обратная матрица существует (в случае каких-либо особенностей матрицы условимся назначать алгоритмам одинаковые веса).

Для оценки оптимальных коэффициентов заменим характеристики оценочных функций, входящие в (10), их выборочными аналогами: выборочным средним, дисперсией и ковариацией. Эти величины определяются по полученным в ходе экспериментов значениям оценочных функций (для оценивания ковариации, рассматриваются различные пары объектов).

Элементы матрицы \mathbf{A} зависят от величин $q_m^{(z)}$, которые являются непосредственно не наблюдаемыми, а также могут меняться для разных пар объектов. Однако по условию задачи оптимальные коэффициенты должны быть постоянными для всех пар. Будем считать величину $q_m^{(z)}$ параметром, принимающим значение q , близкое к 1, так как полученные выражения справедливы для любых пар, в том числе правильно кластеризуемых с большой вероятностью (предполагается, что такие пары объектов существуют).

4.2. Основные шаги алгоритма

Опишем основные шаги предложенного алгоритма построения взвешенного кластерного ансамбля (назовем его CEOW — Cluster Ensemble with Optimized Weights).

Алгоритм CEOW.

Входные данные:

- \mathbf{X} — таблица данных «объект-свойство»;
- μ_1, \dots, μ_M — набор базовых алгоритмов кластерного анализа;
- L_1, \dots, L_M — число запусков каждого базового алгоритма.

Шаги:

1. Запустить каждый базовый алгоритм заданное число раз со случайными значениями параметров, которые выбираются случайным образом из заданного множества возможных значений (распределение, в соответствии с которым инициализируются параметры, фиксировано).
2. Для каждого полученного разбиения определить оценку его качества.
3. Найти оценки величин Γ_m , V_m , C_m , для каждого алгоритма μ_m , а также оценки ковариаций $C_{m,m'}$ для комбинаций различных алгоритмов $\mu_m, \mu_{m'}$.
4. Вычислить оптимальные коэффициенты $\alpha_1, \dots, \alpha_M$ по формуле (11).
5. Вычислить взвешенную коассоциативную матрицу \mathbf{H} по формуле (2).
6. Рассматривая матрицу \mathbf{H} как матрицу попарного сходства объектов, найти итоговое разбиение с помощью алгоритма кластерного анализа, на вход которого подается полученная матрица сходства (для этого можно использовать агломеративный алгоритм построения иерархического разбиения либо спектральный алгоритм).

Конец работы алгоритма.

5. Экспериментальное исследование

Разработанный алгоритм реализован программно на языке Python. Для исследования алгоритма был проведен численный эксперимент. Выборка для тестирования была взята из репозитория задач машинного обучения [18]. Она представляет собой уличные изображения, сегментированные на семь классов.

Эксперимент проводился следующим образом: в качестве базовых алгоритмов использовался алгоритм K -means с разным фиксированным числом кластеров (от семи до максимально допустимого значения, определяемого числом алгоритмов в ансамбле, с шагом один). То, что в качестве базовых алгоритмов используются варианты алгоритма K -means, никак не влияет на применимость полученных теоретических результатов. Каждый алгоритм запускался 20 раз с различной случайной инициализацией центроидов. Оценка качества разбиения находилась с помощью нормированного по всем разбиениям Силуэт-индекса качества [19]. В (10) было взято значение $q = q_m^{(z)} = 1$. Для построения итогового разбиения использовался спектральный алгоритм кластерного анализа [17]. Полученное разбиение сравнивалось с истинным разбиением с помощью исправленного индекса Ранда (ARI) [20]. Более высокое значение индекса свидетельствует о лучшем соответствии разбиений.

В табл. 1 приведены результаты работы алгоритма SEOW, отдельного алгоритма K -means, а также кластерного ансамбля, основанного на вычислении коассоциативной матрицы с равными весами базовых алгоритмов (SEEW — Cluster Ensemble with Equal Weights).

На экспериментальных данных предложенный алгоритм показал более точные результаты, чем алгоритм K -means и аналогичный ансамблевый алго-

Таблица 1. Результаты эксперимента: индекс ARI

Число алгоритмов в ансамбле	CEOW	<i>K</i> -means	CEEW
4	0,410	0,351	0,402
10	0,443	0,351	0,443
16	0,467	0,351	0,453

ритм с равными весами. Также можно заметить, что результаты улучшаются с увеличением числа базовых алгоритмов в ансамбле.

6. Заключение

В работе проведено теоретическое и экспериментальное исследование разнородного кластерного ансамбля, основанного на наборе различных алгоритмов кластерного анализа. Коллективное решение строится путем анализа усредненной коассоциативной матрицы, при нахождении которой учитываются оценки качества полученных вариантов группировки. Для обоснования разработанного метода предложена вероятностная модель ансамблевой классификации, учитывающая коррелированность оценочных функций. В модели делается предположение о существовании «истинных» непосредственно не наблюдаемых классов, которое позволяет вывести оценки качества работы ансамбля. С помощью модели получены аналитические зависимости между оценками качества решения и характеристиками ансамбля (числом его элементов, ожидаемым значением и дисперсией индекса качества, показателями коррелированности алгоритмов). В рамках модели найдено выражение для оптимальных весов, для которых минимальна верхняя граница оценки вероятности ошибки классификации.

Разработан алгоритм, в котором реализован метод построения ансамбля и вычисления оптимальных весов. Экспериментальное исследование подтвердило эффективность предложенного метода: предложенный алгоритм дал более высокую точность, чем отдельный алгоритм *K*-means и аналогичный ансамблевый алгоритм, не использующий оптимизацию весов.

Проведенное исследование имеет ряд ограничений. Работа направлена в основном на получение теоретических зависимостей (в рамках предложенной модели) между характеристиками ансамбля и показателями его качества. При выборе оптимальных весов базовых алгоритмов решалась лишь упрощенная задача оптимизации, поскольку в общем случае удается получить только приближенное численное решение.

В перспективе планируется провести дополнительные экспериментальные исследования модели и метода на различных прикладных задачах. Было бы интересно сравнить решения общей и упрощенной задач оптимизации. Кроме того, планируется рассмотреть более широкий круг базовых алгоритмов кластеризации, входящих в ансамбль (DBSCAN, спектральный алгоритм и

т.д), а также применить разработанный метод в задаче слабоконтролируемого обучения с использованием коассоциативной матрицы ансамбля как матрицы сходства.

Автор благодарит магистранта НГУ В.В. Баранова за помощь в проведении вычислительных экспериментов.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Доказательство утверждения 1. При доказательстве для краткости будем опускать обозначения i, j, \mathbf{X} . Маржинальная функция (5) может быть переписана в виде

$$\begin{aligned} mg(\Psi, Z) &= \sum_{l,m} \alpha_m \gamma_{l,m} \{ \mathbf{I}[h(\Omega_{l,m}) = Z] - \mathbf{I}[h(\Omega_{l,m}) \neq Z] \} = \\ (П.1) \quad &= \sum_{l,m} \alpha_m \gamma_{l,m} (2Z - 1)(2h(\Omega_{l,m}) - 1), \end{aligned}$$

так как для булевых u, v выполняется $\mathbf{I}[u = v] - \mathbf{I}[u \neq v] = (2u - 1)(2v - 1)$. Отсюда получим

$$\begin{aligned} E_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] &= \sum_{l,m} E_{\Psi|z} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2z - 1)(2h(\Omega_{l,m}) - 1)] = \\ &= (2z - 1) \sum_{l,m} \alpha_m E_{\Psi} [\gamma_{l,m}] \left(2E_{\Omega_{l,m}|z} [h(\Omega_{l,m})] - 1 \right) \end{aligned}$$

в силу предполагаемой некоррелированности оценочного функционала $\gamma_{l,m}$ и величины $h(\Omega_{l,m})$, характеризующей данную пару объектов. Так как для каждого m -го множества параметров величины $\Omega_{m,1}, \dots, \Omega_{m,L_m}$ одинаково распределены с Ω_m , то имеем

$$\begin{aligned} E_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] &= (2z - 1) \sum_m \alpha_m \Gamma_m \sum_{l=1}^{L_m} \left(2E_{\Omega_{l,m}|z} [h(\Omega_{l,m})] - 1 \right) = \\ &= (2z - 1) \sum_m \alpha_m \Gamma_m L_m \left(2E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] - 1 \right). \end{aligned}$$

При $z = 0$ выполняется

$$2E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] - 1 = 2P[h_m(\Omega_m) = 1 | Z = 0] - 1 = 2 \left(1 - q_m^{(0)} \right) - 1 = 1 - 2q_m^{(0)},$$

а при $z = 1$ —

$$2E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] - 1 = 2P[h_m(\Omega_m) = 1 | Z = 1] - 1 = 2q_m^{(1)} - 1.$$

Значит, для произвольного $z \in \{0, 1\}$ можно записать:

$$(П.2) \quad 2E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] - 1 = (2z - 1) \left(2q_m^{(z)} - 1 \right).$$

Отсюда

$$\begin{aligned} E_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] &= (2z - 1)^2 \sum_m \alpha_m \Gamma_m L_m \left(2q_m^{(z)} - 1\right) = \\ &= \sum_m \alpha_m L_m \Gamma_m \left(2q_m^{(z)} - 1\right). \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь условную дисперсию маржинальной функции. Из выражения (П.1), свойств дисперсии, предположения об условной независимости решений и о некоррелируемости решений для пары объектов и оценочным функционалом группировки получим:

$$\begin{aligned} \text{Var}_{\Psi|z}[mg(\Psi, Z)] &= (2z - 1)^2 \text{Var}_{\Psi|z} \left[\sum_{l,m} \alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1) \right] = \\ \text{(П.3)} \quad &= \text{Var}_{\Psi|z} \left[\sum_{l,m} \alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1) \right] = \\ &= \sum_{l,m} \text{Var}_{\Psi|z} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1)] + \\ &+ \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \text{cov} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1), \alpha_{m'} \gamma_{l',m'} (2h(\Omega_{l',m'}) - 1)]. \end{aligned}$$

Рассмотрим группы слагаемых в (П.3) по очереди начиная с первой (обозначив ее через A). В силу предположения о некоррелируемости решений для пары объектов и оценочным функционалом группировки, получим:

$$\begin{aligned} \text{(П.4)} \quad A &= \sum_{l,m} \text{Var}_{\Psi|z} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1)] = \\ &= \sum_{l,m} \alpha_m^2 \left\{ \text{Var}_{\Psi} [\gamma_{l,m}] \text{Var} [2h(\Omega_{l,m}) - 1] + (E_{\Psi} [\gamma_{l,m}])^2 \text{Var} [2h(\Omega_{l,m}) - 1] + \right. \\ &\quad \left. + (E[2h(\Omega_{l,m}) - 1])^2 \text{Var}_{\Psi} [\gamma_{l,m}] \right\} = \\ &= \sum_{l,m} \alpha_m^2 \left\{ 4V_m \text{Var} [h(\Omega_{l,m})] + 4(\Gamma_m)^2 \text{Var} [h(\Omega_{l,m})] + (2E[h(\Omega_{l,m})] - 1)^2 V_m \right\} = \\ &= \sum_m \alpha_m^2 L_m \left\{ 4V_m \text{Var} [h(\Omega_m)] + 4(\Gamma_m)^2 \text{Var} [h(\Omega_m)] + \right. \\ &\quad \left. + (2z - 1)^2 \left(2q_m^{(z)} - 1\right)^2 V_m \right\} \end{aligned}$$

(в последнем выражении было использовано свойство (П.2)). Далее,

$$\begin{aligned} \text{Var}_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] &= E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)^2] - (E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)])^2 = \\ &= E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] (1 - E_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)]) \end{aligned}$$

(так как $h(\Omega_m)^2 = h(\Omega_m)$). Отсюда для $z = 0$ получим:

$$\text{Var}_{\Omega_m|z=0} [h(\Omega_m)] = \left(1 - q_m^{(0)}\right) q_m^{(0)};$$

а для $z = 1$:

$$\text{Var}_{\Omega_m|z=1} [h(\Omega_m)] = q_m^{(1)} \left(1 - q_m^{(1)}\right).$$

Можно записать:

$$\text{Var}_{\Omega_m|z} [h(\Omega_m)] = q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right).$$

Воспользовавшись тождеством

$$\left(2q_m^{(z)} - 1\right)^2 = 1 - 4q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right),$$

перепишем (П.4):

$$\begin{aligned} A &= \sum_{l,m} \text{Var}_{\Psi|z} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1)] = \\ \text{(П.5)} \quad &= \sum_m \alpha_m^2 L_m \left\{ 4V_m q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right) + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right) + \right. \\ &\left. + \left(1 - 4q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right)\right) V_m \right\} = \sum_m \alpha_m^2 L_m \left\{ V_m + 4(\Gamma_m)^2 q_m^{(z)} \left(1 - q_m^{(z)}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Преобразуем теперь вторую группу слагаемых в (П.3), обозначив ее через B :

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \text{cov} [\alpha_m \gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1), \alpha_{m'} \gamma_{l',m'} (2h(\Omega_{l',m'}) - 1)] = \\ &= \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \alpha_m \alpha_{m'} \left\{ E [\gamma_{l,m} \gamma_{l',m'} (2h(\Omega_{l,m}) - 1) (2h(\Omega_{l',m'}) - 1)] - \right. \\ &\quad \left. - E [\gamma_{l,m} (2h(\Omega_{l,m}) - 1)] E [\gamma_{l',m'} (2h(\Omega_{l',m'}) - 1)] \right\}. \end{aligned}$$

В силу предположения о некоррелируемости оценочных функций и решений для пары объектов и так как $\Omega_{l,m}, \Omega_{l',m'}$ независимы для различных сочетаний $(l, m) \neq (l', m')$, выполняется:

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \alpha_m \alpha_{m'} E [2h(\Omega_{l,m}) - 1] E [2h(\Omega_{l',m'}) - 1] \times \\ &\quad \times \left\{ E [\gamma_{l,m} \gamma_{l',m'}] - E [\gamma_{l,m}] E [\gamma_{l',m'}] \right\}. \end{aligned}$$

Так как $\Omega_{l,m}$, $\Omega_{l',m'}$ одинаково распределены с Ω_m , $\Omega_{m'}$ соответственно, то, воспользовавшись (П.2), получим:

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \alpha_m \alpha_{m'} (2z-1)^2 \left(2q_m^{(z)} - 1\right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1\right) \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m}] = \\ &= \sum_{\substack{l,m,l',m': \\ (l,m) \neq (l',m')}} \alpha_m \alpha_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1\right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1\right) \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m}]. \end{aligned}$$

Суммирование в последнем выражении ведется как внутри каждого m -го множества параметров, так и по сочетаниям различных множеств с индексами m , m' , поэтому

$$\begin{aligned} B &= \sum_m \alpha_m \left(2q_m^{(z)} - 1\right)^2 \sum_{\substack{l,l'=1 \\ l \neq l'}}^{L_m} \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m}] + \\ &+ \sum_{\substack{m,m': \\ m \neq m'}} \alpha_m \alpha_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1\right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1\right) \sum_{l,l'} \text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m'}]. \end{aligned}$$

Так как $\text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m}] = C_m$, а $\text{cov}[\gamma_{l,m}, \gamma_{l',m'}] = C_{m,m'}$, то

$$\begin{aligned} B &= \sum_m \alpha_m^2 L_m (L_m - 1) \left(2q_m^{(z)} - 1\right)^2 C_m + \\ \text{(П.6)} \quad &+ \sum_{\substack{m,m': \\ m \neq m'}} \alpha_m \alpha_{m'} L_m L_{m'} \left(2q_m^{(z)} - 1\right) \left(2q_{m'}^{(z)} - 1\right) C_{m,m'}. \end{aligned}$$

Таким образом, подставив (П.5) и (П.6) в (П.3), получим искомое выражение для дисперсии (7).

Утверждение 1 доказано.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Миркин Б.Г.* Методы кластер-анализа для поддержки принятия решений: обзор. М.: Изд. дом НИУ ВШЭ, 2011.
2. *Duda R.O., Hart P.E., Stork D.G.* Pattern Classification. Second Edition. Wiley, NY. 2000.
3. *Jain A.K., Dubes R.C.* Algorithms for clustering data. Prentice Hall, NJ, 1988.
4. *Jain A.K.* Data clustering: 50 years beyond k-means. Pattern Recognition Letters. 2010. Vol. 31, No. 8. P. 651–666.
5. *Zhuravlev Yu.I., Nikiforov V.V.* Algorithms for recognition based on calculation of evaluations // Kibernetika. 1971. Vol. 3. P. 1–11.

6. *Ryazanov V.V.* On the synthesis of classifying algorithms in finite sets of classification algorithms (taxonomy). USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1982. Vol. 22, Iss. 2. P. 186–198.
7. *Breiman L.* Random Forests // Machine Learning. 2001. Vol. 45(1). P. 5–32.
8. *Kuncheva L.* Combining Pattern Classifiers. Methods and Algorithms. Wiley, NJ. 2004.
9. *Schapire R., Freund Y., Bartlett P., Lee W.* Boosting the margin: a new explanation for the effectiveness of voting methods. Annals of Statistics. 1998. Vol. 26(5). P. 1651–1686.
10. *Ghosh J., Acharya A.* Cluster ensembles. Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery. 2011. Vol. 1(4). P. 305–315.
11. *Vega-Pons S., Ruiz-Shulcloper J.A.* Survey of Clustering Ensemble Algorithms. 2011. IJPRAI 25(3), 337–372.
12. *Topchy A., Law M., Jain A., Fred A.* Analysis of Consensus Partition in Cluster Ensemble // Fourth IEEE International Conference on Data Mining (ICDM'04). 2004. P. 225–232.
13. *Berikov V., Pestunov I.* Ensemble clustering based on weighted co-association matrices: Error bound and convergence properties // Pattern Recognition. 2017. Vol. 63. P. 427–436.
14. *Wu Y., Liu L., Xie Z., Chow K.H., Wei W.* Boosting Ensemble Accuracy by Revisiting Ensemble Diversity Metrics. In Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2021. P. 16469–16477.
15. *Rashidi F., Nejatian S., Parvin H., Rezaie V.* Diversity based cluster weighting in cluster ensemble: an information theory approach. Artificial Intelligence Review. 2019. Vol. 52(2). P. 1341–1368.
16. *Wang Z., Parvin H., Qasem S.N., Tuan B.A., Pho K.H.* Cluster ensemble selection using balanced normalized mutual information. Journal of Intelligent & Fuzzy Systems, (Preprint). 2020. P. 1–23.
17. *Liu J., Han J.* Spectral clustering. Data Clustering. Chapman and Hall/CRC. 2018. P. 177–200.
18. <http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/image+segmentation>.
19. *Rousseeuw P.J.* Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. Journal of computational and applied mathematics. 1987. Vol. 20. P. 3–65.
20. *Hubert L., Arabie P.* Comparing partitions. Journal of Classification. 1985. Vol. 2(1). P. 193–218.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 01.02.2022

После доработки 25.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022

© 2022 г. В.Е. АНЦИПЕРОВ, канд. физ.-мат. наук
(antciperov@cplire.ru)
(Институт радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова РАН, Москва)

ГЕНЕРАТИВНАЯ МОДЕЛЬ АВТОКОДИРОВЩИКОВ, САМООБУЧАЮЩИХСЯ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ, ПРЕДСТАВЛЕННЫХ ВЫБОРКАМИ ОТСЧЕТОВ¹

В работе обосновывается концепция автокодировщиков, ориентированных на автоматическую генерацию сжатых изображений. Предлагается решение задачи синтеза подобных автокодировщиков в контексте методов машинного обучения, понимаемого здесь как обучение по выборке из самих же данных. Для этих целей разработано специальное представление изображений с помощью выборок отсчетов контролируемого размера (выборочных представлений). Основываясь на специфике данного представления формализуется порождающая (генеративная) модель автокодировщиков, которая затем конкретизируется до вероятностной параметрической модели отсчетов в виде смеси компонент. На основе концепции рецептивных полей обсуждается редукция общей модели смеси компонент до сеточной модели финитных компонент экспоненциального семейства, допускающего синтез реалистических с вычислительной точки зрения алгоритмов кодирования.

Ключевые слова: машинное обучение, автокодировщики, генеративная модель, смеси распределений, EM алгоритм, рецептивные поля.

DOI: 10.31857/S0005231022120091, **EDN:** KSXBRK

1. Введение

Настоящее время характеризуется как эпоха больших данных (Big Data). Большие данные, содержащиеся, например, в сети интернет, включают записи медицинских наблюдений, данные регистрации аудио-, фото- и видеопотоков, сканированные документы, графические презентации и т.д. Эти данные поступают из разных источников, поэтому характеризуются высокой разнообразностью (variety). Сверх того, более 80% этих данных являются неструктурированными, что сильно затрудняет их передачу, хранение и использование. Большинство изображений в глобальной сети также относятся к категории неструктурированных данных [1]. Учитывая, что сеть интернет является крупнейшим мировым репозитарием изображений, можно только сожалеть о том, что невозможно в полной мере воспользоваться имеющимися ресурсами.

¹ Работа выполнена за счет бюджетного финансирования в рамках государственного задания в ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН (ГЗ “РЭЛДИС”).

Существует несколько подходов к преодолению означенной выше проблемы больших данных [2]. Например, ввиду того, что исходные изображения часто имеют высокое качество, а для многих приложений этого не требуется, целесообразно передавать, хранить и использовать изображения в сжатом виде. Эта нехитрая мысль объединяет тем не менее огромный пласт практических исследований. Отметим, что объем этих исследований в последнее время только возрос в связи с замечательными успехами в областях нейронных сетей, глубокого обучения, искусственного интеллекта и т.д. (см. обзор [3]).

Вместе с тем, несмотря на целый ряд новых идей, привнесенных из области машинного обучения в практику сжатия изображений, большинство новых методов по-прежнему базируются на фундаментальных идеях Клода Шеннона, составляющих основу теории передачи данных с потерями (rate-distortion theory) [4]. Последняя, по сути, посвящена фундаментальному компромиссу между стремлением увеличить скорость передачи некоторого закодированного представления исходных данных и стремлением уменьшить искажения, обусловленные возможными потерями части информации в процессе сжатия / кодирования. Изначально полагалось, что цель теории состоит в том, чтобы найти такой способ кодирования исходных (входных) данных, который максимально минимизировал бы отклонение от них восстановленных (выходных) данных при заданной скорости передачи. Однако известно, что в области сжатия (кодирования) изображений минимизация отклонений сама по себе не обязательно ведет к хорошему качеству восприятия восстановленных изображений. Например, показано, что использование методов кодирования в генеративно-состязательных сетях может приводить к заметному улучшению качества восприятия изображения, хотя искажение исходного изображения может быть не минимальным [5]. В связи с этим в последнее время был предпринят ряд попыток включения в теорию кодирования изображений дополнительных элементов, повышающих результирующее качество их восприятия [6, 7].

Кардинальному пересмотру в новых подходах подверглись классические методы оценивания качества изображений с помощью функций искажения (distortion functions), которые определяются обычно как абсолютные или квадратичные отклонения восстановленной версии изображения от оригинала. Это связано с тем, что подобные простые функциональные метрики мало адекватны особенностям восприятия изображений человеком, и по этим причинам вплоть до недавнего времени визуальное качество изображений оценивалось специалистами, как правило, с помощью категориальных шкал, связанных с субъективными оценками в группах зрителей. По этой причине первые попытки корректировки теории были направлены на поиски тех нетрадиционных метрик, которые были бы объективно связаны с визуальным качеством. Основным требованием к таким метрикам была их высокая корреляция с известными категориальными оценками качества. Среди наиболее известных перцептивных метрик (perceptual metrics [2]) можно отметить метрику структурного подобия (SSIM) [8] / метрику многомасштабного струк-

турного подобия (MS-SSIM) [9], метрику на основе визуальной информации (VIF) [10], метрику на основе пространственного и временного наиболее очевидного искажения (MAD) [11].

Однако наибольших успехов в повышении качества восприятия восстановленных изображений удалось достичь не с помощью усовершенствования метрик искажений, а на пути пересмотра самой концепции искажений. Речь идет о генеративном моделировании (generative modeling), набирающем все большую популярность в машинном обучении [12]. Генеративные модели рассматривают всю совокупность (входных / выходных) данных как набор случайных переменных и в отличие от дискриминантных моделей (discriminative models) ориентированы на их совместные вероятностные распределения, нежели на условные. К генеративным моделям, в частности, относятся генеративно-состязательные сети (GAN) [13], вариационные автокодировщики (VAE) [14], глубокие сети доверия (DBN) [15] и т.д.

Практическая успешность генеративных моделей теоретически выяснена не полностью, однако, часто приходится слышать суждение о том, что это может быть связано с более адекватным моделированием особенностей естественного интеллекта [16]. Действительно, по мере развития перечисленных выше подходов [13–15] каждый новый этап разработки добавлял новые элементы, моделирующие особенности иерархической архитектуры коры, глубокого обучения с подкреплением, рабочей памяти в рекуррентных корковых сетях, долговременной памяти и т.д. В этой связи следует сделать особый акцент на роли представлений данных. Моделирование функций и структуры коры само в значительной степени предопределяют представления входных – промежуточных – выходных данных и их взаимосвязи. Вместе с тем существует ряд примеров, когда именно удачный выбор представлений данных позволил существенно повысить эффективность реализуемых на их основе функций [13–15]. Исходя из этого вопросы выбора представлений данных должны по-видимому играть не последнюю роль в разработке новых методов кодирования изображений, ориентированных на высокое качество восприятия.

В данной работе, основываясь на генеративной модели обучения без учителя [12], предлагается новый подход к задачам кодирования изображений на основе данных самих же изображений посредством рекуррентных автокодировщиков. Предлагаемый подход строится на основе ранее разработанного специального представления изображений (входных данных) с помощью выборки отсчетов контролируемого размера (выборочных представлений) [17, 18]. Поскольку в рамках генеративной модели полное статистическое описание выборочных представлений задается произведением плотностей распределения вероятностей отдельных отсчетов, в основе предлагаемого подхода лежит, по существу, статистическая проблема оценки плотностей распределения вероятностей (density estimation) [19]. В данной работе ограничимся классом параметрических процедур оценивания [19], что подразумевает задание некоторого параметрического семейства распределе-

ний вероятностей. В качестве последнего предлагается использовать модель смеси компонент из семейства экспоненциальных распределений (exponential family distributions) [20]. Соответственно в качестве кодированных изображений (выходных данных) используется совокупность оценок параметров компонент и их весов, вычисляемых по выборочному представлению (входным данным). В данном контексте оптимальное кодирование синтезируется на основе метода максимального правдоподобия. Показано, что решение уравнения максимального правдоподобия для модели смеси компонент приводит к рекуррентной процедуре кодирования, которая на каждой итерации, подобно популярному EM-алгоритму [21], включает два шага. На первом шаге (мягкого) разбиения выборки осуществляется стохастическая ассоциация отсчетов с компонентами смеси, а на втором производится пересчет оценок. Для целей алгоритмической (компьютерной) реализации процедуры кодирования вводится представление модели в виде системы рецептивных полей, представляющих собой локальные плотности распределения вероятностей отсчетов, покрывающих в совокупности все поле изображения. Предложенное представление позволяет значительно снизить требования алгоритма кодирования к вычислительным ресурсам. Кроме того, за счет некоторого упрощения представления, подобного используемому, например, в вариационном EM [22], процедура кодирования сводится к хорошо известным алгоритмам брегмановской мягкой / жесткой сегментации [23], LBG алгоритму векторного квантования [24], K-means кластеризации [25] и самоорганизующимся картам Кохонена [26]. Перечисленные взаимосвязи позволяют рассматривать предлагаемую процедуру как обобщение по нескольким направлениям хорошо известных методов машинного обучения. Теоретические аспекты предложенного подхода перцептивного сжатия изображений иллюстрируются по ходу статьи результатами компьютерного моделирования.

2. Представление изображений выборками случайных отсчетов

В нескольких предыдущих работах (см., например, [17, 18]) было предложено представление изображений наборами случайных отсчетов (photon counting statistics [27]). Данное представление мотивировано, с одной стороны, прогрессом в развитии SPAD-матриц на основе однофотонных лавинных диодов [28], а с другой стороны, постоянно растущей тенденцией моделирования механизмов зрительного восприятия в задачах цифровой обработки изображений [29]. Отсчетное представление предполагает соответствующее устройство формирования изображения (photon counting imaging system [27]), содержащее большое число точечных детекторов, причем предполагается, что последние настолько малы, что каждый из них может регистрировать одиночные фотоны падающего излучения.

Формально под идеальным устройством формирования изображения будем понимать плоскую 2D-поверхность Ω , на которой вплотную друг к другу расположены идентичные точечные детекторы, или “джоты” в терминах [28],

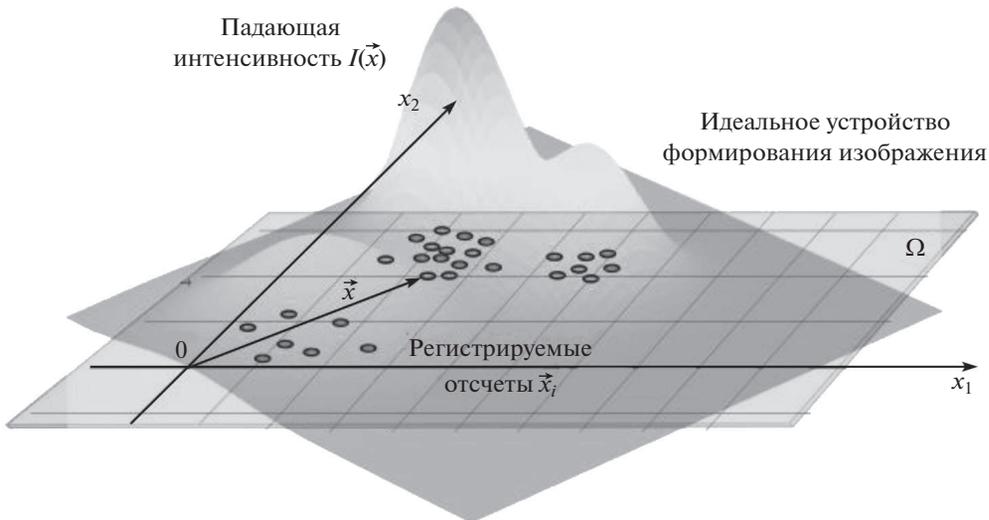


Рис. 1. Идеальное устройство формирования изображения и результат регистрации падающего излучения интенсивности $I(\vec{x})$ в виде набора фотоотсчетов $X = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$.

(см. рис. 1), имеющие малую площадь ds светочувствительной поверхности. Соответственно, общее количество детекторов будет $N = S/ds$, где S — общая площадь поверхности Ω . Идеально, в предположении, что S фиксирована, а $ds \rightarrow 0$, число детекторов $N \rightarrow \infty$. Таким образом, идеальное устройство формирования изображения — это почти непрерывная чувствительная поверхность Ω с координатами $\vec{x} = (x_1, x_2)$, задающими положения идеальных точечных детекторов, как это представлено на рис. 1.

Регистрация падающего на Ω излучения интенсивности $I(\vec{x}, t)$ проявляется, согласно современным физическим представлениям [30], в происходящих на микроуровне случайных событиях, связанных с поглощением фотонов. Эти события, в зависимости от типа используемых фотодетекторов, могут состоять в высвобождении фотоэлектронов из p - n переходов полупроводниковых детекторов, в изменении конформации молекул родопсина рецепторов сетчатки, в образовании атомов металлического Ag из галогенидов серебра в фотоэмульсиях и т.д. Все подобные события обычно объединяются общим термином фотоотсчеты, или просто отсчеты (по поводу терминологии см. [27]). В модели идеального устройства формирования изображений отсчеты являются событиями случайными в смысле классической теории вероятностей и задаются пространственными координатами — случайными векторами $\vec{x} \in \Omega$ (совпадающими с координатами соответствующих точечных детекторов) и случайными же моментами времени регистрации $\vec{t} \in (t, t + dt)$. В полуклассическом приближении [30] вероятность отсчета за время $dt \rightarrow 0$ равна $P_1(\vec{x}) = \alpha I(\vec{x}, \vec{t}) ds dt$, где $\alpha = \eta(h\bar{\nu})^{-1}$, $h\bar{\nu}$ — средняя энергия регистрируемого фотона (h — постоянная Планка, $\bar{\nu}$ — характерная частота излуче-

ния), безразмерный коэффициент $\eta < 1$ является квантовой эффективностью материала детектора.

На основе модели идеального устройства формирования изображений можно сформулировать модель идеального изображения [17, 18]. Под идеальным изображением понимается (упорядоченный) набор $X = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ n случайных отсчетов, регистрируемых идеальным устройством в течение времени экспозиции T . Таким образом, идеальное изображение представляет собой даже при заданной (детерминированной) интенсивности $I(\vec{x}, t)$ случайный объект. При этом случайный характер идеального изображения определяется не только случайными координатами \vec{x}_i отсчетов, но и случайным числом n их общего количества в наборе X .

Полное статистическое описание идеальных изображений в виде всех конечномерных плотностей распределений $\rho(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, n | I(\vec{x}, \bar{t}))$ может быть получено в предположении условной независимости отсчетов \vec{x}_i (при заданной регистрируемой интенсивности $I(\vec{x})$). Стандартный вывод статистического описания, опирающегося на пуассоновскую аппроксимацию при $ds \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, $Nds = S = \text{const}$ совместной вероятности большого ансамбля бернулиевских точечных детекторов (успех — регистрация фотоотсчета с вероятностью $P_1(\vec{x})$, неудача — отсутствие регистрации с вероятностью $P_0(\vec{x}) = 1 - P_1(\vec{x})$), можно найти, например, в [31]. Приведем здесь лишь окончательный результат, отвечающий стационарному случаю ($I(\vec{x}, \bar{t}) = I(\vec{x})$):

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, n | I(\vec{x})) &= \rho(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n | n, I(\vec{x})) \times P_n(I(\vec{x})) = \\ &= \prod_{i=1}^n \rho(\vec{x}_i | I(\vec{x})) \times P_n(I(\vec{x})), \end{aligned} \quad (1)$$

$$P_n(I(\vec{x})) = \frac{\bar{n}^n}{n!} \exp(-\bar{n}), \quad \bar{n} = \alpha T \iint_{\Omega} I(\vec{x}) ds,$$

где \bar{n} — среднее число всех отсчетов, $\rho(\vec{x}_i | I(\vec{x}))$ — плотность вероятности отсчета:

$$\rho(\vec{x}_i | I(\vec{x})) = \frac{I(\vec{x})}{\iint_{\Omega} I(\vec{x}) ds}. \quad (2)$$

Отметим, что полное статистическое описание (1), (2) совпадает с распределением вероятностей событий 2D-точечного пуассоновского процесса на Ω [31], интенсивность событий которого $\lambda(\vec{x})$ с точностью до αT совпадает с интенсивностью $I(\vec{x})$ зарегистрированного излучения.

Из (2) следует, что плотность распределения вероятностей отсчета $\vec{x} \in \Omega$ при регистрации излучения идеальным устройством формирования изображений совпадает с нормированной интенсивностью $I(\vec{x})$ этого излучения на Ω . Отметим в этой связи универсальный характер (2): условная плотность

распределения вероятностей не зависит ни от квантовой эффективности материала детекторов η , ни от спектра (в том числе характерной частоты $\bar{\nu}$ излучения), ни от времени экспозиции T . Более того, она не зависит и от единиц измерения $I(\vec{x})$, будь то абсолютные физические единицы или условные, полученные в результате оцифровки.

Модель идеального изображения и статистическое описание (1), (2) часто используются при низких интенсивностях $I(\vec{x})$ излучений, например, в областях флуоресцентной микроскопии, позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ), однофотонной эмиссионной компьютерной томографии (ОФЭКТ), оптической и инфракрасной астрономии и т.д. [32]. Однако при обычных интенсивностях, соответствующих, например, дневному свету, практическое использование модели идеального изображения оказывается проблематичным. Дело в том, что потоки фотонов, например, от солнца в ясный день огромны — на площадке $S \sim 1mm^2$ на поверхности земли они составляют $\bar{n} \sim 10^{15} - 10^{16}$ фотонов/с. Очевидно, что работа с такими потоками данных потребует в практических задачах слишком больших ресурсов. Поэтому для задач представления изображений с помощью отсчетов желательнее скорректировать приведенную выше модель идеального изображения.

Некоторое время назад было предложено следующее решение проблемы отсчетных представлений [17]. Зафиксируем с самого начала некоторое приемлемое значение размеров представления $k \ll \bar{n}$ и, рассматривая идеальное изображение $X = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ как некоторую генеральную совокупность случайных отсчетов, осуществим из нее, в полном соответствии с традициями классической статистики, случайную выборку в k отсчетов $X_k = (\vec{x}_{j_1}, \dots, \vec{x}_{j_k})$. Очевидно, такое “выборочное” представление по-прежнему, хотя и при гораздо меньшем размере данных, представляет исходное изображение X . Назовем X_k представлением изображения выборкой случайных отсчетов или, короче, выборочным представлением. Статистическое описание выборочных представлений легко следует из (1), (2) в результате интегрирования $\rho(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, n | I(\vec{x}))$ по невыбранным в X_k отсчетам и суммирования результатов по их числу $l = n - k = 0, 1, \dots$:

$$(3) \quad \rho(X_k | I(\vec{x})) = \prod_{j=1}^k \rho(\vec{x}_j | I(\vec{x})) \times P_{n \geq k}(I(\vec{x})),$$

$$P_{n \geq k}(I(\vec{x})) = \sum_{l=0}^{\infty} P_{k+l}(I(\vec{x})),$$

где $P_{n \geq k}(I(\vec{x}))$ обозначает вероятность того, что в идеальном изображении содержится более, чем k отсчетов. Учитывая пуассоновский характер вероятностей P_n и их асимптотическое стремление при $n \rightarrow \infty$ к гауссовому распределению со средним \bar{n} , несложно показать, что в случае $\bar{n} \gg 1$ вероятность $P_{n < k}(I(\vec{x}))$ будет меньше ε , как только $k < 2\varepsilon\bar{n}$ и, соответственно, $P_{n \geq k}(I(\vec{x}))$ будет отличаться от единицы менее, чем на ε . Считая далее, что для пред-

ставления изображений выборками случайных отсчетов X_k размеры последних удовлетворяют $k \ll \bar{n}$ и полагая $P_{n \geq k}(I(\vec{x})) = 1$, с точностью до малого $\varepsilon = k/2\bar{n}$, получим из (3):

$$(4) \quad \rho(X_k | I(\vec{x})) = \prod_{j=1}^k \rho(\vec{x}_j | I(\vec{x})).$$

Заметим, что (4) формально следует из (2) в предположении, что идеальное устройство формирования изображений при регистрации излучения интенсивности $I(\vec{x})$ практически наверное содержит (гораздо) больше отсчетов, чем размер выборочного представления k . Именно, предполагая в этих обстоятельствах условную независимость произвольных k отсчетов $\vec{x}_j \in \Omega$, придем сразу же к (4), перемножив плотности распределений (2).

Статистическое описание (4) для выборочных представлений $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ имеет ряд привлекательных свойств (новая нумерация соответствует номерам выбранных отсчетов, а не отсчетам идеального изображения X , как это было выше). Это описание, во-первых, фиксирует условную независимость и одинаковое условное распределение (iid свойство) всех k отсчетов $\{\vec{x}_j\}$. Во-вторых, плотности распределений отдельных отсчетов $\rho(\vec{x}_j | I(\vec{x}))$ кратны распределению интенсивности $I(\vec{x})$ по поверхности Ω изображения (см. (2)). И, в-третьих, как это было отмечено выше, описание (4) также обладает свойством универсальности — не зависит ни от квантовой эффективности материала детекторов η , ни от спектра излучения, ни от времени экспозиции T . Таким образом, перечисленные свойства выборочных представлений осуществляют удобную форму представления входных данных для многих хорошо разработанных статистических подходов и методов машинного обучения, включая наивный байесов подход.

Более того, ввиду независимости распределений $\rho(\vec{x}_j | I(\vec{x}))$ в (4) от абсолютных значений интенсивности (см. (2)) статистические описания выборочных представлений X_k также не зависят от единиц измерения интенсивности $I(\vec{x})$. В частности, если интенсивность зарегистрированного излучения задана пикселями $\{m_i\}$ некоторого цифрового изображения, описание (4) не зависит от величины порога квантования $Q = \Delta I$, а будет определяться только битовой глубиной пикселей v (или числом уровней квантования 2^v).

В связи с последним замечанием отметим, что процедуру формирования выборочного представления для цифровых изображений можно по существу свести к нормировке $\pi_i = m_i/\Sigma m_i$ значений пикселей $m_i \sim I_i/Q$ изображения и последующему семплированию k отсчетов из полученного распределения вероятностей $\rho(\vec{x}_j | I(\vec{x})) \approx \pi_i$. Если учесть, что в области машинного обучения существует целый арсенал методов семплирования, объединенных общим названием методов Монте-Карло [33], то формирование выборочных представлений цифровых изображений можно с алгоритмической точки зрения рассматривать как применение стандартных процедур.



Рис. 2. Представление изображения “Cameman” выборками случайных отсчетов: *a* — исходное изображение в формате TIFF; *б, в, г* — представления выборками размеров, соответственно, 500 000, 1 000 000, 5 000 000 отсчетов.

Для примера на рис. 2 приведены представления выборками случайных отсчетов стандартного тестового изображения “Cameman”, широко используемого в публикациях по обработке изображений. Изображение “Cameman” задано изначально в формате TIFF, имеет размеры $s \times s = 512 \times 512$ пикселей (72 dpi), серое, с глубиной цвета $v = 8$ бит. Семплирование выборочных представлений в $k = 500\,000, 1\,000\,000, 5\,000\,000$ отсчетов осуществлялось одним из самых простых методов — семплированием с отклонением (rejection sampling [33]) при равномерном вспомогательном распределении $g(\vec{x}) = 1/s \times s = 512^{-2}$ и верхнеграницной константе $M = 2^v / \bar{m} = 256 / \bar{m}$, где $\bar{m} = \Sigma m_i / s \times s$ — среднее значение пикселей изобраа-

жения. Алгоритмическая реализация приведенной процедуры сводится, таким образом, к случайному выбору равномерно распределенных на поверхности изображения Ω с координатами (x_1, x_2) — числами с плавающей точкой случайных векторов \vec{x}_j и включения их в выборку отсчетов X_k при выполнении теста $u_j < t_i$, где i — индекс содержащего \vec{x}_j пикселя изображения, а u_j — реализация случайной, равномерно распределенной на $(0, 2^v)$ величины. Отметим, что для этой процедуры нормировка пикселей не требуется.

В связи с приведенным примером еще раз подчеркнем различие в природе цифровых изображений и их выборочных представлений. Всякое цифровое изображение, например растровое (bitmap), является детерминированным объектом, представляющим собой раз и навсегда зафиксированную реализацию (вообще говоря случайного) процесса регистрации излучения. Любая обработка такого изображения — фильтрация, децимация, выравнивание гистограммы и т.д. всегда будет приводить при заданном алгоритме к одному и тому же результату. Наоборот, как отмечалось выше, выборочные представления $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ являются случайными объектами и каждая новая процедура их формирования будет давать реализацию, слегка отличную от предыдущих. Соответственно, обработка разных реализаций приведет к несколько отличающимся результатам. Трактовать эти отличия следует статистически, как это делается, например, в теории статистического оценивания. В частности, при увеличении размера выборочного представления k следует ожидать, что относительные отклонения по реализациям будут стремиться к нулю, демонстрируя проявление закона больших чисел. Некоторое представление об асимптотическом поведении выборочных представлений дает рис. 2.

3. Кодирование и декодирование изображений, представленных выборками случайных отсчетов

В области машинного обучения автокодировщики (автоэнкодеры, АЭ) рассматриваются как особый класс искусственных нейронных сетей [34], но для целей данной работы желательно определить их с более общей точки зрения. А именно, будем рассматривать АЭ как некоторый класс информационных систем, понимая под последними интегрированные системы компонент для сбора, хранения и обработки данных. В контексте настоящей работы под данными естественно подразумеваются изображения. Традиционно АЭ имеют симметричную трехуровневую структуру вход — внутреннее представление (код) — выход, симметрия подразумевает подобие выхода входу.

Пары соседних уровней составляют в АЭ две взаимные компоненты: кодер, включающий уровни вход–код, и декодер, включающий уровни код–выход [35]. Цель АЭ — восстановить данные на выходе, соблюдая при этом определенные ограничения, накладываемые на внутреннюю кодировку. Ввиду имеющихся ограничений не разрешается просто копировать данные со ввода на выход. Типичные ограничения связаны с уменьшением размерно-

сти промежуточных данных \vec{z} . В свете подходов машинного обучения кодирование \vec{z} осуществляется на основе обучения АЭ без учителя (unsupervised learning) [35]. Отметим, что термин “автокодировщик” часто используется как синоним автоассоциативных, репликативных и др. нейронных сетей.

Для конкретизации АЭ в контексте данной работы возьмем за основу формально-математическую структуру абстрактного АЭ [36]. Структура АЭ включает множество G возможных изображений, полученных при регистрации излучения интенсивности $I(\vec{x})$ и множество F — их внутренних (кодовых) представлений. Также она включает классы операторов $f : G \rightarrow F$ (кодеры) и $g : F \rightarrow G$ (декодеры), согласованные по размерностям с G и F и с заданными ограничениями. Кроме того, структура АЭ предполагает количественную меру $D(I(\vec{x}), I_r(\vec{x}))$ расхождения (искажения) между изображением $I(\vec{x})$ на входе и некоторым его восстановленным вариантом $I_r(\vec{x})$ на выходе. Обычно эту меру называют функцией потерь [35]. В рамках приведенной структуры задачей АЭ является минимизация функции потерь по отношению к операторам f и g

$$(5) \quad \{f^*, g^*\} = \underset{f, g}{\operatorname{arg\,min}} D(I(\vec{x}), g \circ f(I(\vec{x}))).$$

Любое решение f^* уравнения (5) рассматривается как желаемое кодирование для последующего оптимального восстановления g^* изображения. К сожалению, решение (5) в общем виде — задача нереальная. Поэтому при изучении практических задач необходимо конкретизировать некоторые элементы общей структуры АЭ. Различные виды АЭ могут быть получены в зависимости от выбора множеств G и F , специальных классов операторов f и g , явного вида функции потерь D , а также наличия дополнительных ограничений, таких как гладкость, размерность и пр.

В рамках данной работы входными данными АЭ являются k -выборки случайных отсчетов — выборочные представления $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$, порожденные плотностью распределения вероятностей координат отсчетов $\rho(\vec{x} | I(\vec{x}))$, кратной регистрируемой интенсивности $I(\vec{x})$ (2). Таким образом, вполне разумно выбрать в качестве множества входных изображений G множество плотностей распределения $\{\rho(\vec{x} | I(\vec{x}))\}$, $\vec{x} \in \Omega$. Это автоматически подводит к порождающим (генеративным) моделям АЭ [35]. В отличие от дискриминантных АЭ, которые наиболее естественно интерпретировать как регуляризирующие операторы, автокодировщики в генеративной парадигме рассматривают внутренние данные (код) F как латентные переменные, а операцию кодирования как процедуру статистического вывода (нахождения кодовых представлений по заданному выборочному представлению X_k). В связи с этим генеративные модели учатся скорее восстанавливать по обучающим выборочным наблюдениям (выборочному представлению) X_k порождающие их вероятностные распределения, нежели отображать входные данные в выходные. В качестве примеров генеративных подходов отметим вариационные автокодировщики (VAE) [14] и генеративные стохастические сети (GSN) [37].

Чтобы формализовать порождающую модель для выборочных представлений изображений $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$, рассмотрим множество G как некоторое параметрическое семейство $G = \{\rho(\vec{x} | \vec{\theta}), \vec{x} \in \Omega, \vec{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^p\}$ плотностей распределения вероятностей отсчета \vec{x} . Параметризация G является распространенным подходом, упрощающим общую задачу функциональной оптимизации (5) до задачи оценки оптимальных параметров. Обучение без учителя для генеративной модели АЭ заключается в нахождении тех оптимальных параметров $\vec{\theta}^* \in \Theta$, которые определяют выход АЭ в виде плотности $\rho(\vec{x} | \vec{\theta}^*) \in G$ наилучшим образом соответствующей представлению X_k как выборке данных на входе.

Формально представление X_k не является элементом G и не может рассматриваться как вход для АЭ, задаваемый некоторыми параметрами $\vec{\theta}$ (посредством $\rho(\vec{x} | \vec{\theta}) \in G$). Однако, рассуждая в духе байесовского подхода, предполагая некоторое распределение параметров $\rho(\vec{\theta} | X_k)$ при заданной выборке X_k , можно выразить связанное с обучением вероятностное распределение в виде:

$$(6) \quad \rho(\vec{x} | X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)) = \iint_{\Theta} \rho(\vec{x} | \vec{\theta}) \rho(\vec{\theta} | X_k) d\vec{\theta}.$$

Далее, согласно (П.8), из Приложения плотность распределения апостериорной вероятности $\rho(\vec{\theta} | X_k)$ является, по крайней мере асимптотически, при $k \gg 1$ более узкой функцией θ , чем $\rho(\vec{x} | \vec{\theta})$. Поскольку максимум $\rho(\vec{\theta} | X_k)$ приходится при этом на оценку максимального правдоподобия $\vec{\theta}_{ML}$, плотность $\rho(\vec{x} | \vec{\theta})$ может быть вынесена из последнего интеграла в (6) как $\rho(\vec{x} | \vec{\theta}_{ML})$, что приводит к следующему соотношению:

$$(7) \quad \rho(\vec{x} | X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)) \cong \rho(\vec{x} | \vec{\theta}_{ML}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)).$$

Тем самым, предполагая что на входе имеется некоторая плотность распределения $\rho(\vec{x} | \vec{\theta})$, задачей АЭ является формирование таких параметров $\vec{\theta}^*$, максимально близких к $\vec{\theta}_{ML}$, которые бы на выходе дали плотность $\rho(\vec{x} | \vec{\theta}^*)$ максимально подобную, в соответствии с (7), входной. Другими словами, задача автокодировщика в генеративной парадигме сводится к решению уравнений максимального правдоподобия Р. Фишера [38]:

$$(8) \quad \vec{\theta}_{ML} = \arg \max_{\vec{\theta} \in \Theta} L(\theta; X_k),$$

$$L(\theta; X_k) = \ln(\rho(X_k | \vec{\theta})) = \ln \left(\prod_{j=1}^k \rho(\vec{x}_j | \vec{\theta}) \right) = \sum_{j=1}^k \ln(\rho(\vec{x}_j | \vec{\theta})),$$

где традиционно использована функция логарифмического правдоподобия выборочного представления $L(\theta; X_k)$, которая представляет собой ввиду (4)

сумму функций логарифмического правдоподобия по всем отсчетам выборки X_k . Отметим, что формально (8) можно получить, если использовать в качестве функции потерь $D(\dots)$ (5) дивергенцию Кульбака–Лейблера [39] между эмпирическим распределением $\rho(\vec{x} | X_k)$ (6) и параметрическим $\rho(\vec{x} | \vec{\theta}) \in G$ [19].

Кажущаяся элегантность сформулированной основной задачи АЭ (8) в рамках генеративной модели связана с переносом акцента с проблемы кодирования входных данных на проблему вычисления оценок максимального правдоподобия. Последняя задача, известная более ста лет, начиная с основополагающих работ Р. Фишера [38], в реальных приложениях может оказаться не проще (с вычислительной точки зрения), чем синтез дискриминантных кодировщиков. По этим причинам сделаем еще один шаг в уточнения генеративной модели АЭ, основанной на специфических особенностях архитектуры, связанных с внутренними переменными $\vec{z} \in F$, составляющими промежуточное представление данных на входе. Для этих целей уточним генеративную модель автокодировщиков $G = \{\rho(\vec{x} | \vec{\theta})\}$ как модель смеси компонент, в которой внутренние (скрытые) переменные \vec{z} возникают естественным образом.

4. Генеративная модель автокодировщика в виде семейства смеси компонент

Возьмем в качестве параметрического семейства

$$G = \{\rho(\vec{x} | \vec{\theta}), \quad \vec{x} \in \Omega, \quad \vec{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^p$$

плотностей распределения вероятностей отсчета \vec{x} семейство смесей из K компонент [20] вида

$$(9) \quad \rho(\vec{x} | \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^K w_i \rho_i(\vec{x} | \vec{\theta}),$$

где $\{w_i\}$, $w_i \geq 0$, $i = 1, \dots, K$ являются нормированными весами компонент в смеси и связаны условием $\sum_{i=1}^K w_i = 1$, а $\{\rho_i(\vec{x} | \vec{\theta})\}$, $\rho_i(\vec{x} | \vec{\theta}) \geq 0$, $i = 1, \dots, K$ являются плотностями распределения вероятностей $\vec{x} \in \Omega$ для каждой из компонент. С точки зрения статистики, смесь (9) формально можно интерпретировать как маргинальное распределение по \vec{x} , если для всех отсчетов наряду с координатами \vec{x} ввести случайные скрытые (латентные) целочисленные переменные $z \in \{1, \dots, K\}$, ассоциирующие отсчет с компонентой $i = z$ смеси. При этом, интерпретируя веса $\{w_i\}$ как априорное распределение вероятностей z , а плотности $\rho_i(\vec{x} | \vec{\theta})$ как условные распределения $\rho(\vec{x} | z = i, \vec{\theta})$, слагаемые $w_i \rho_i(\vec{x} | \vec{\theta}) = w_i \rho(\vec{x} | z = i, \vec{\theta}) = \rho(\vec{x}, z = i | \vec{\theta})$ в (9) можно интерпретировать как совместные распределения вероятностей “полных” наборов дан-

ных $\{\vec{x}, z\}$, а $\rho(\vec{x} | \vec{\theta})$ как маргинальное по отношению к нему распределение

$$(10) \quad \begin{aligned} \rho(\vec{x}, z | \vec{\theta}) &= w_z \rho_z(\vec{x} | \vec{\theta}), \\ \rho(\vec{x} | \vec{\theta}) &= \sum_{z=1}^K \rho(\vec{x}, z | \vec{\theta}). \end{aligned}$$

Обычно априорные вероятности $\{w_i\}$ являются частью множества параметров $\vec{\theta}$ смеси. В отношении же оставшихся параметров предполагается, что они могут быть разбиты на K непересекающихся групп $\{\vec{\nu}_i\}$, $i = 1, \dots, K$, $\vec{\nu}_i \in \Xi \subset \mathbb{R}^q$ так, что от параметров z -й группы, и только от них зависят условные распределения $\rho_z(\vec{x} | \vec{\theta}) = \rho_z(\vec{x} | \vec{\nu}_z)$. Таким образом, полный набор параметров модели $\vec{\theta} = \{\{w_i\}, \{\vec{\nu}_i\}\} \in \Theta \subset \mathbb{R}^p$, $i = 1, \dots, K$, $p = K(q + 1)$ рассматривается как объединение наборов весов $\{w_i\}$ и параметров $\{\vec{\nu}_i\}$ компонент. Отметим, что в $\vec{\theta}$ по крайней мере часть параметров — $\{w_i\}$ зависимы — связаны условием нормировки. В сделанных предположениях модель смеси (10) уточняется посредством $\rho(\vec{x}, z | \vec{\theta}) = w_z \rho_z(\vec{x} | \vec{\nu}_z)$.

С учетом (10) задача нахождения максимума функции правдоподобия (8) для смесей принимает вид (в предположении, что помимо условия нормировки для $\{w_i\}$ другие ограничения на параметры отсутствуют):

$$(11) \quad \begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} L(\vec{\theta}^*; X_k) &= \sum_{j=1}^k \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} \ln(\rho(\vec{x}_j | \vec{\theta}^*)) = \\ &= \sum_{j=1}^k \frac{1}{\rho(\vec{x}_j | \vec{\theta}^*)} \sum_{z_j=1}^K \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} \rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}^*) = \\ &= \sum_{j=1}^k \sum_{z_j=1}^K \frac{\rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}^*)}{\rho(\vec{x}_j | \vec{\theta}^*)} \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} \ln(\rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}^*)) = \\ &= \sum_{j=1}^k \sum_{z_j=1}^K \rho(z_j | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*) \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} \ln(\rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}^*)) = \lambda \vec{\mathfrak{S}}, \end{aligned}$$

где $\rho(z | \vec{x}, \vec{\theta}) = \rho(\vec{x}, z | \vec{\theta}) / \rho(\vec{x} | \vec{\theta})$ — апостериорная вероятность скрытых переменных z , а вектор $\vec{\mathfrak{S}}$ является индикатором частных производных по параметрам-весам: он состоит из нулей, кроме единиц, на местах соответствующих $\partial L(\vec{\theta}^*; X_k) / \partial w_i$ в левой части (11). Кратный $\vec{\mathfrak{S}}$ вектор $\lambda \vec{\mathfrak{S}}$ возникает при применении метода неопределенных множителей Лагранжа для условной максимизации $L(\vec{\theta}; X_k)$ с ограничением нормировки на $\{w_i\}$. Соответственно неопределенный множитель λ находится из условия $\sum_{i=1}^K w_i^*(\lambda) = 1$.

Уравнения максимального правдоподобия (11) содержат в левой части линейную комбинацию градиентов логарифмических функций правдоподобия отсчетов (функций вкладов — score functions) $\vec{\nabla}_{\vec{\theta}} l(\vec{\theta}; \vec{x}_j, z_j) =$

$= \vec{\nabla}_{\vec{\theta}} \ln(\rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}))$, которую обычно проще анализировать, чем саму логарифмическую функцию правдоподобия $L(\vec{\theta}; X_k)$. Действительно, используя $\rho(\vec{x}_j, z_j | \vec{\theta}) = w_{z_j} \rho_{z_j}(\vec{x}_j | \vec{v}_z)$ (см. (10) и далее), получим

$$(12) \quad \frac{\partial l(\vec{\theta}^*; \vec{x}_j, z_j)}{\partial w_z} = \frac{\delta_{z_j z}}{w_{z_j}^*},$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{v}_z} l(\vec{\theta}^*; \vec{x}_j, z_j) = \vec{\nabla}_{\vec{v}_{z_j}} \ln(\rho_{z_j}(\vec{x}_j | \vec{v}_{z_j}^*)) \delta_{z_j z},$$

где $\delta_{z_j z}$ — символ Кронекера.

Подстановка (12) в (11) упрощает уравнения максимального правдоподобия до:

$$(13) \quad \frac{\partial L(\vec{\theta}^*; X_k)}{\partial w_z} = \frac{\sum_{j=1}^k \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*)}{w_z^*} = \lambda,$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{v}_z} L(\vec{\theta}^*; X_k) = \sum_{j=1}^k \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*) \vec{\nabla}_{\vec{v}_z} \ln(\rho_z(\vec{x}_j | \vec{v}_z^*)) = \vec{0}.$$

Домножая уравнения, содержащие λ каждое на w_z^* и суммируя их по z , получим, вследствие условий нормировки $\{w_i^*\}$ и апостериорных распределений $\rho(z | \vec{x}, \vec{\theta})$, что значением неопределенного множителя является $\lambda = k$. Это позволяет освободиться от λ в уравнениях (13) и придать им следующую компактную форму: 0

$$(14) \quad z = 1, \dots, K,$$

$$w_z^* = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*),$$

$$\sum_{j=1}^k \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*) \vec{\nabla}_{\vec{v}_z} \ln(\rho_z(\vec{x}_j | \vec{v}_z^*)) = \vec{0}.$$

Дальнейшее уточнение уравнений (14) максимально-правдоподобного восстановления изображений по выборке $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ зависит от выбора вида зависимости плотностей (условного) распределения вероятностей отсчетов $\rho_z(\vec{x}_j | \vec{v}_z)$ от параметров \vec{v}_z для каждой из z -компонент (от конкретизации параметрической модели смеси (10)). Основная идея, лежащая в основе предлагаемой ниже модели, связана с теорией рецептивных полей.

5. Генеративная модель автокодировщика с компонентами смеси в виде рецептивных полей

Теория рецептивных полей позволяет использовать в задачах обработки изображений современные представления о механизмах восприятия челове-

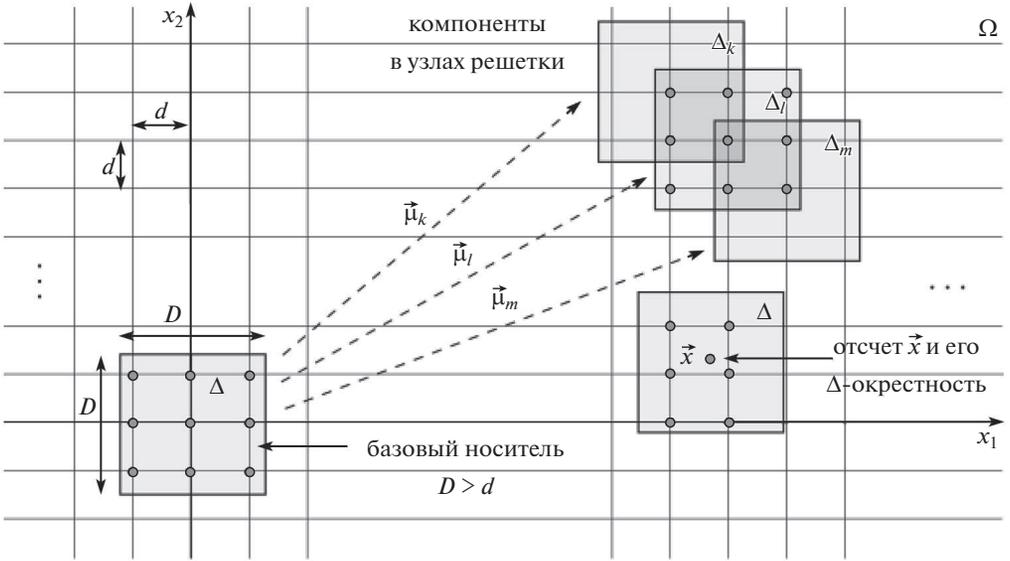


Рис. 3. Простейшая геометрия расположения носителей компонент $\{\Delta_z\}$ в узлах $\{\vec{\mu}_z\}$ прямоугольной сетки, покрывающей Ω . Показаны базовый носитель Δ и Δ -окрестность произвольной точки $\vec{x} \in \Omega$ с принадлежащими им узлами сетки.

ком зрительных образов. Основная концепция теории заключается в том, что извлекаемая из изображений информация содержится не в значениях интенсивности, зарегистрированной отдельными рецепторами, а формируется на основе анализа кооперативной активности рецепторов, составляющих определенные локальные области [40, 41]. Основными доводами, согласно которым необходимо анализировать интенсивность по областям изображения, а не по отдельным точечным детекторам, являются, с одной стороны, необходимость накопления стимула по группам рецепторов для формирования значимого суммарного сигнала для выходных нейронов сетчатки, а с другой стороны, необходимость сжатия полного потока данных от рецепторов ввиду ограниченной пропускной способности зрительного канала. Подобные локальные области, составляющие зоны ответственности отдельных выходных зрительных нейронов, традиционно называют рецептивными полями. Функциональное описание рецептивных полей и способы их алгоритмического описания можно найти в [42].

В соответствии с концепцией рецептивных полей примем, что компоненты — плотности совместных распределений $\rho_z(\vec{x} | \vec{v}_z)$ (10) имеют финитные, не зависящие от параметров \vec{v}_z носители $\Delta_z = \{\vec{x} | \rho_z(\vec{x} | \vec{v}_z) > 0\}$, расположенные в узлах $\vec{\mu}_z$ некоторой воображаемой сетки, покрывающей область изображения Ω (см. рис. 3). Предполагается, что совокупность всех носителей $\{\Delta_z\}$ составляет покрытие области изображения: $\Omega \subset \bigcup_{z=1}^K \Delta_z$. Таким

образом, множество носителей компонент $\{\Delta_z\}$ играет роль совокупности рецептивных полей.

Предположим далее для простоты, что набор компонент является однородным в области Ω — с точностью до расположений узлов $\{\vec{\mu}_z\}$ все условные распределения $\{\rho_z(\vec{x} | \vec{v}_z)\}$ принадлежат одному общему параметрическому семейству плотностей $g = \{\eta(\vec{\xi} | \vec{v})\}$, $\nu \in \Xi \subset \mathbb{R}^q$, так что $\rho_z(\vec{x} | \vec{v}_z) = \eta(\vec{x} - \vec{\mu}_z | \vec{v}_z)$. В этом случае параметрическое семейство смесей (10) имеет трансляционно-инвариантный по отношению к сетке вид

$$(15) \quad \rho(\vec{x} | \vec{\theta}) = \sum_{z=1}^K w_z \eta(\vec{x} - \vec{\mu}_z | \vec{v}_z).$$

Предполагается также, что все элементы семейства $g = \{\eta(\vec{\xi} | \vec{v})\}$ имеют общий финитный носитель Δ , который будет в дальнейшем называться базовым носителем. Поскольку компоненты (15) являются перемещенными в узлы сетки $\{\vec{\mu}_z\}$ элементами семейства, их носители $\{\Delta_z\}$ также будут перемещенными в узлы сетки копиями базового носителя Δ . Сам же базовый носитель, расположенный в окрестности начала координат \mathbb{R}^2 , будет предполагаться симметричным в том смысле, что вместе с каждой своей точкой $\vec{\xi} \in \Delta$ он содержит также и $-\vec{\xi}$, в частности, содержит начало координат $\vec{0}$. Характерный размер базового носителя обозначим как D . Примером симметричного базового носителя является прямоугольный носитель Δ размеров $D \times D$ на рис. 3.

Для перекрытия (носителей) соседних компонент необходимым условием является $D > d$, где d — шаг сетки. Это же условие необходимо для принятого предположения о покрытии области Ω объединением носителей всех компонент $\{\Delta_z\}$. Отметим здесь, что для прямоугольной сетки в случае прямоугольной формы базового носителя условие $D > d$ также и достаточно, для круглой формы носителя достаточно $D > \sqrt{2}d$.

При покрытии Ω совокупностью носителей $\{\Delta_z\}$ каждая точка $\vec{x} \in \Omega$ принадлежит хотя бы одному из носителей. Поэтому множество узлов сетки, носители которых содержат \vec{x} , не пусто. Обозначим множество индексов этих узлов посредством $\delta_{\vec{x}} = \{z | \vec{x} \in \Delta_z\}$ и назовем его сеточным окружением \vec{x} . Заметим, что в силу симметричности базового носителя Δ , в $\delta_{\vec{x}}$ попадут те и только те узлы сетки, которые содержатся в области, полученной смещением в точку \vec{x} базового носителя Δ (см. рис. 3). Поскольку в смеси (15) компоненты, носители которых не содержат \vec{x} , обращаются в ноль, представление смеси с использованием сеточного окружения $\delta_{\vec{x}}$ можно записать в сжатом виде

$$(16) \quad \rho(\vec{x} | \vec{\theta}) = \sum_{z \in \delta_{\vec{x}}} w_z \eta(\vec{x} - \vec{\mu}_z | \vec{v}_z),$$

где в отличие от (15) область суммирования по скрытым переменным z зависит от \vec{x} . При размерах сеточных окружений $|\delta_{\vec{x}}| \ll K$ в смеси (16) для каждой

точки \vec{x} слагаемых будет намного меньше K (как формально предполагается в (15)).

Последним предположением относительно параметрического семейства смесей (16) является уточнение явного вида семейства $g = \{\eta(\vec{\xi} | \vec{\nu})\}$. Достаточно гибким и удобным с вычислительной точки зрения выбором представляется семейство экспоненциально-скошенных распределений (family of exponentially tilted densities) [43]. Семейство экспоненциально-скошенных распределений задается некоторой, не зависящей от параметров ν плотностью распределения вероятностей $\rho_0(\vec{\xi})$ и ее экспоненциально-скошенными, зависящими от параметров $\nu \in \Xi \subset \mathbb{R}^2$ версиями:

$$(17) \quad \eta(\vec{\xi} | \vec{\nu}) = \exp\{\vec{\xi}^T \vec{\nu} - A(\vec{\nu})\} \rho_0(\vec{\xi}),$$

где T — операция векторного транспонирования.

Отметим, что нормировка плотностей $\rho_0(\vec{\xi})$ и $\eta(\vec{\xi} | \vec{0})$ в (17) ведет к условию $A(\vec{0}) = 0$, или $\rho_0 = \eta(\vec{\xi} | \vec{0})$. Другими словами, определяющая семейство плотность $\rho_0(\vec{\xi})$ сама является элементом семейства. Более того, как следует из (17), носитель $\rho_0(\vec{\xi})$ задает базовый носитель Δ для всего семейства. В частности, ограниченность и симметрия Δ будут обеспечены, если $\rho_0(\vec{\xi})$, финитная и симметричная плотность, что в дальнейшем предполагается выполненным.

Функция параметров $A(\vec{\nu})$ в (17) обеспечивает нормировку плотностей $\eta(\vec{\xi} | \vec{\nu})$ при любых $\vec{\nu}$, что равносильно выполнению условия

$$(18) \quad A(\vec{\nu}) = \ln \left\{ \int_{\Delta} \exp(\vec{\xi}^T \vec{\nu}) \rho_0(\vec{\xi}) d\vec{\xi} \right\}.$$

Из (18) следует ввиду симметричности $\rho_0(\vec{\xi})$, что $A(\vec{\nu})$ также является симметричной функцией. Далее, ввиду финитности $\rho_0(\vec{\xi})$, функция параметров $A(\vec{\nu})$ определена и аналитична на всей плоскости \mathbb{R}^2 (и даже на \mathbb{C}^2). Из (18) также следует, что $A(\vec{\nu})$ является логарифмом двумерного преобразования Лапласа от $\rho_0(\vec{\xi})$, что характеризует ее как производящую функцию кумулянтов [44] для $\rho_0(\vec{\xi})$ (см. в этой связи Приложение (П.9)). Впрочем, через $A(\vec{\nu})$ достаточно просто выражается и производящая функция кумулянтов $\psi(\vec{\nu}')$ самого распределения $\eta(\vec{\xi} | \vec{\nu})$ (17): $\psi(\vec{\nu}') = A(\vec{\nu}' + \vec{\nu}) - A(\vec{\nu})$, что для первых моментов $\vec{\zeta}_{\vec{\nu}}$ и $R_{\vec{\nu}}$ дает:

$$(19) \quad \begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{\nu}'} \psi(\vec{0}) &= \vec{\nabla} A(\vec{\nu}) = \vec{\zeta}_{\vec{\nu}} = \int_{\Delta} \vec{\xi} \eta(\vec{\xi} | \vec{\nu}) d\vec{\xi}, \\ \vec{\nabla}_{\vec{\nu}'} \vec{\nabla}_{\vec{\nu}'}^T \psi(\vec{0}) &= \vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A(\vec{\nu}) = R_{\vec{\nu}} = \int_{\Delta} (\vec{\xi} - \vec{\zeta}_{\vec{\nu}})(\vec{\xi} - \vec{\zeta}_{\vec{\nu}})^T \eta(\vec{\xi} | \vec{\nu}) d\vec{\xi}. \end{aligned}$$

Как следует из (19), матрица Гесса $\vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A(\vec{\nu})$ при любых $\vec{\nu}$ является корреляционной матрицей $R_{\vec{\nu}}$ распределения (17), поэтому она всюду положительно определена и, как следствие, всюду строго выпукла. Последнее обстоятельство обеспечивает взаимную однозначность отображения $\vec{\nu} \rightarrow \vec{\zeta}_{\vec{\nu}} = \vec{\nabla} A(\vec{\nu})$. Ввиду этой взаимной однозначности можно вместо параметров $\vec{\nu}$, называемых в контексте экспоненциальных семейств натуральными (или каноническими) [44], пользоваться параметрами средних $\vec{\zeta}$. Заметим, что в соответствии $\vec{\nu} \leftrightarrow \vec{\zeta}$ в силу симметрии $A(\vec{\nu})$ ноль отображается в ноль.

Переход к параметрам средних в (17) тесно связан с преобразованием Лежандра [43] функции $A(\vec{\nu})$ (18):

$$(20) \quad A^*(\vec{\zeta}) = \max_{\vec{\nu} \in \Xi} \left(\vec{\zeta}^T \vec{\nu} - A(\vec{\nu}) \right).$$

Максимум в (20) достигается на решении уравнения $\vec{\nabla} A(\vec{\nu}_{\vec{\zeta}}) = \vec{\zeta}$, а его величина $A^*(\vec{\zeta})$ равна значению выражения $\vec{\zeta}^T \vec{\nu}_{\vec{\zeta}} - A(\vec{\nu}_{\vec{\zeta}})$. Отметим, что для симметричной $A(\vec{\nu})$ ее дуальная по Лежандру функция $A^*(\vec{\zeta})$ также симметрична.

Если переобозначить в (20) $\vec{\zeta} \rightarrow \vec{\xi}$, можно с учетом явного вида дуальной по Лежандру функции $A^*(\vec{\zeta})$ преобразовать показатель экспоненты в (17) следующим образом:

$$(21) \quad \begin{aligned} \vec{\xi}^T \vec{\nu} - A(\vec{\nu}) &= \vec{\xi}^T (\vec{\nu} - \vec{\nu}_{\vec{\xi}}) - A(\vec{\nu}) + A(\vec{\nu}_{\vec{\xi}}) + A^*(\vec{\xi}) = \\ &= -B_A(\vec{\nu}, \vec{\nu}_{\vec{\xi}}) + A^*(\vec{\xi}), \end{aligned}$$

где введена связанная с $A(\vec{\nu})$ дивергенция Брегмана (Bregman divergence) [45]:

$$(22) \quad B_A(\vec{\nu}, \vec{\nu}') = A(\vec{\nu}) - A(\vec{\nu}') - \vec{\nabla}^T A(\vec{\nu}')(\vec{\nu} - \vec{\nu}').$$

Аналогично дивергенции $B_A(\dots)$ (22) можно ввести дивергенцию Брегмана $B_{A^*}(\dots)$, связанную с дуальной функцией $A^*(\vec{\zeta})$ (20). Оказывается, что обе эти дивергенции также связаны соотношением дуальности $B_A(\vec{\nu}, \vec{\nu}') = B_{A^*}(\vec{\zeta}', \vec{\zeta})$, где предполагается $\vec{\zeta} = \vec{\nabla} A(\vec{\nu})$, $\vec{\zeta}' = \vec{\nabla} A(\vec{\nu}')$ [45]. Поэтому, на основе (21), (22) семейство скошенных распределений (17) можно переписать в параметрах средних в виде

$$(23) \quad \eta(\vec{\xi} | \vec{\zeta}) = \eta(\vec{\xi} | \vec{\nu}_{\vec{\zeta}}) = \exp\{-B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta})\} \exp\{A^*(\vec{\xi})\} \rho_0(\vec{\xi}).$$

Отметим, что хотя форма (23) распределений семейства не столь явно как (17) выражает деформацию симметричной плотности $\rho_0(\vec{\xi})$, она также содержит некоторую трактовку скошенных распределений, ввиду следующей из (19) интерпретации $\vec{\zeta}$ как среднего от $\vec{\xi}$. Именно форма (23) представляет плотности семейства как произведение факторов $\exp\{-B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta})\}$ — купола-подобной функции, достигающей максимума в $\vec{\xi} = \vec{\zeta}$ и $\exp\{A^*(\vec{\xi})\} \rho_0(\vec{\xi})$ —

симметричной функции, имеющей максимум в нуле. Эту трактовку можно подчеркнуть еще больше, если воспользоваться приближенным выражением (П.15) из Приложения для фактора $\exp\{A^*(\vec{\xi})\}\rho_0(\vec{\xi}) \simeq 1/2\pi D^2$, где D — стандартное отклонение для плотности $\rho_0(\vec{\xi})$, которое также можно интерпретировать как характерный размер базового носителя Δ :

$$(24) \quad \eta(\vec{\xi} | \vec{\zeta}) = \frac{1}{2\pi D^2} \exp\{-B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta})\}.$$

Приближенная форма (24) в еще большей степени подчеркивает интерпретацию $\eta(\vec{\xi} | \vec{\zeta})$ в параметрах средних как смещенное в точку $\vec{\zeta}$ симметричное распределение $\rho_0(\vec{\xi})$. Отметим, что для (не финитных) симметричных гауссовых плотностей, для которых $R_{\vec{v}} = R_0 = D^2 E$, форма (24) оказывается точной.

Возвращаясь к системе уравнений максимального правдоподобия (14), выразим входящие в эти уравнения градиенты логарифмических функций правдоподобия $\ln(\rho_z(\vec{x} | \vec{v}_z)) = \ln(\eta(\vec{x} - \vec{\mu}_z | \vec{v}_z))$ через средние параметры $\vec{\zeta}_z$ согласно (23) и воспользуемся тем обстоятельством, что $\vec{\zeta}_z = \vec{\nabla} A(\vec{v}_z)$ и, следовательно, $\|\vec{\nabla}_{\vec{v}_z} \vec{\zeta}_z^T\| = \vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A(\vec{v}_z)$

$$(25) \quad \begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{v}_z} \ln(\eta(\vec{x} - \vec{\mu}_z | \vec{v}_z)) &= \|\vec{\nabla}_{\vec{v}_z} \vec{\zeta}_z^T\| \vec{\nabla}_{\vec{\zeta}_z} \{-B_{A^*}(\vec{x} - \vec{\mu}_z, \vec{\zeta}_z)\} = \\ &= -\vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A(\vec{v}_z) \vec{\nabla}_{\vec{\zeta}_z} B_{A^*}(\vec{x} - \vec{\mu}_z, \vec{\zeta}_z) = \vec{x} - \vec{\mu}_z - \vec{\zeta}_z. \end{aligned}$$

где учтено, что согласно (22) $\vec{\nabla}_{\vec{\zeta}} B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta}) = -\vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A^*(\vec{\zeta})(\vec{\xi} - \vec{\zeta})$ и матрицы $\vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A^*(\vec{\zeta})$ и $\vec{\nabla} \vec{\nabla}^T A(\vec{v})$ взаимнообратны. Отметим, что получившееся в результате простое выражение в правой части (25) является главным аргументом перехода к параметрам средних. Однако здесь следует сделать важное замечание. На самом деле соотношения (25) выполняются не для всех \vec{x} , а только для тех, которые принадлежат носителю Δ_z данной компоненты. Для прочих \vec{x} целесообразно положить градиенты (25) равными нулю.

Подставляя (25) в (14), окончательно получим систему уравнений максимального правдоподобия для нахождения оптимальных параметров $\vec{\theta}^* = \{\{w_z^*\}, \{\nu_z^*\}\} \in \Theta$

$$(26) \quad \begin{aligned} z &= 1, \dots, K, \\ w_z^* &= \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*), \\ \vec{\zeta}_z^* &= \frac{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} (\vec{x}_j - \vec{\mu}_z) \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*)}{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*)}, \end{aligned}$$

где при суммировании по отсчетам \vec{x}_j учтено, что плотность $\rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^*) \sim \rho(\vec{x}_j, z | \vec{\theta}^*)$ отлична от нуля только в Δ_z .

Система уравнений (26) является относительно простой нелинейной системой, выражающей искомое решение $\vec{\theta}^*$ через функцию от него же и от отсчетов выборки (выборочного представления) $X_k = \{\vec{x}_j\}$:

$$(27) \quad \vec{\theta}^* = H(\vec{\theta}^*, X_k).$$

Простейшим методом решения уравнений вида (27) является метод последовательных приближений (successive approximations) [46], который по ν -приближению $\vec{\theta}^{(\nu)}$ итеративно находит следующее приближение $\vec{\theta}^{(\nu+1)} = H(\vec{\theta}^{(\nu)}, X_k)$. Существует много методов численного решения подобных уравнений [47]. Особенности каждого из этих методов определяются особенностями итерирующей функции $H(\dots)$.

В случае системы (26) особенностью функции $H(\vec{\theta}, X_k)$ является то, что она зависит от $\vec{\theta}$ только через плотности апостериорных распределений $\rho(z | \vec{x}, \vec{\theta})$. Поэтому естественно разбить вычисления каждой итерации на два шага: на первом вычислить все апостериорные распределения:

$$\text{I} \quad j = 1, \dots, k, \quad z \in \delta_{\vec{x}_j}$$

$$(28) \quad \begin{aligned} \rho_j^{(\nu+1)}(z) &= \rho(z | \vec{x}_j, \vec{\theta}^{(\nu)}) = \frac{w_z^\nu \rho_z(\vec{x}_j | \vec{\theta}^{(\nu)})}{P_j^{(\nu)}} = \frac{w_z^\nu \eta(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z | \zeta_z^{(\nu)})}{P_j^{(\nu)}} = \\ &= \frac{w_z^\nu}{P_j^{(\nu)}} \exp \left\{ -B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z, \vec{\zeta}_z^{(\nu)}) \right\} \exp \{ A^*(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z) \} \rho_0(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z), \\ P_j^{(\nu)} &= \rho(\vec{x}_j | \vec{\theta}^{(\nu)}) = \sum_{i \in \delta_{\vec{x}_j}} w_i^\nu \eta(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i | \zeta_i^{(\nu)}) = \\ &= \sum_{i \in \delta_{\vec{x}_j}} w_i^\nu \exp \left\{ -B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i, \vec{\zeta}_i^{(\nu)}) \right\} \exp \{ A^*(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i) \} \rho_0(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i), \end{aligned}$$

а уже на втором шаге пересчитать текущее приближение

$$\text{II} \quad z = 1, \dots, K$$

$$(29) \quad \begin{aligned} w_z^{(\nu+1)} &= \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \rho_j^{(\nu+1)}(z), \\ \vec{\zeta}_z^{(\nu+1)} &= \frac{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} (\vec{x}_j - \vec{\mu}_z) \rho_j^{(\nu+1)}(z)}{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \rho_j^{(\nu+1)}(z)}. \end{aligned}$$

Двухшаговая итеративная вычислительная схема **I** (28) и **II** (29) соответствует шагам E и M известного EM-алгоритма для смесей распределений экспоненциального семейства [48]. Известно, что EM-алгоритм, когда число компонент K относительно невелико (~ 10 – 100) вполне стабилен и позволяет в обозримое время находить максимально-правдоподобные оценки $\vec{\theta}^*$. К сожалению, при больших объемах данных k и больших размерах моделей K , например, для стандартных цифровых изображений, применение традиционного EM-алгоритма оказывается проблематичным. Проблемы эти связаны с высокими требованиями к объему памяти $k \times K$ и соответственно с большим объемом вычислений, а также с низкой скоростью сходимости (линейной) EM-алгоритма [21]. В предложенной нами модели рецептивных полей, ввиду уменьшения требуемого объема памяти до $k \times |\bar{\delta}|$, где $|\bar{\delta}| \ll K$ — среднее число узлов в решеточных окружениях отсчетов, и сокращения объема вычислений ввиду ограниченного суммирования по компонентам в (28) и отсчетам в (29), требования к ресурсам гораздо меньше, чем для EM-алгоритма в общей версии, особенно при большом числе K компонент.

Вместе с тем, несмотря на очевидную экономию ресурсов, при очень больших $K \sim 10^4$ – 10^6 , представляющих интерес для реальных изображений, объем вычислений в предложенной схеме может оказаться по-прежнему высоким. В этом случае можно несколько снизить объем памяти и вычислений, если воспользоваться аппроксимацией (24). Используя ее, вычисления на шаге **I** (28) можно организовать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{I} \quad & j = 1, \dots, k, \quad z \in \delta_{\vec{x}_j} \\
 (30) \quad & \rho_j^{(\nu+1)}(z) = \frac{w_z^\nu \exp \left\{ -B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z, \vec{\zeta}_z^{(\nu)}) \right\}}{\sum_{i \in \delta_{\vec{x}_j}} w_i^\nu \exp \left\{ -B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i, \vec{\zeta}_i^{(\nu)}) \right\}} = \\
 & = \mathbf{softmax}_z \left(\left\{ \ln(w_i^\nu) - B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i, \vec{\zeta}_i^{(\nu)}) \mid i \in \delta_{\vec{x}_j} \right\} \right),
 \end{aligned}$$

где $\mathbf{softmax}_z$ — z -компонента softmax-функции [49]. Вместе с шагом **II** (29) шаг **I** (30) почти совпадает со схемой мягкой брегмановской кластеризации (Bregman Soft Clustering), обсуждавшейся в [23]. Отличие состоит лишь в том, что в **I** (30) для расчета апостериорных плотностей $\rho_j^{(\nu+1)}(z)$ используются брегмановские дивергенции между локальными по отношению к компоненте z координатами отсчетов $\vec{x}_j - \vec{\mu}_z$ и локальными же координатами центроида $\vec{\zeta}_z^{(\nu)}$ тех отсчетов \vec{x}_j , которые принадлежат носителю Δ_z этой компоненты

$$(31) \quad \vec{\zeta}_z^{(\nu)} = \frac{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \vec{x}_j \rho_j^{(\nu)}(z)}{\sum_{\vec{x}_j \in \Delta_z} \rho_j^{(\nu)}(z)} - \vec{\mu}_z.$$

В схеме же мягкой брегмановской кластеризации [23] используются брегмановские дивергенции $B_{A^*}(\vec{x}, \vec{M}_z)$ между собственно координатами отсчетов \vec{x} и их несмещенными центроидами $\vec{M}_z = \vec{\zeta}_z^{(\nu)} + \vec{\mu}_z$. Поскольку в общем случае дивергенция Брегмана не является трансляционно-инвариантной функцией: $B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_z, \vec{\zeta}_z^{(\nu)}) \neq B_{A^*}(\vec{x}_j, \vec{\zeta}_z^{(\nu)} + \vec{\mu}_z)$, обсуждаемые схемы вычислений не тождественны. Они совпадают только в одном частном случае квадратичных по разности аргументов дивергенций Брегмана, соответствующих случаю гауссовских компонент. Таким образом, предложенная схема вычисления максимально-правдоподобных оценок параметров $\vec{\theta}^*$ отличается свойством локальности обучения в отличие от известных процедур мягкой брегмановской кластеризации [23].

Оказывается, можно еще более сэкономить вычислительные ресурсы, если воспользоваться “жестким” приближением значений `softmax` функции в (30), аппроксимировав нулями все ее z -компоненты кроме максимальной, для которой выбирается значение 1. При этом шаг **I** (30) сведется к задаче максимизации:

$$\begin{aligned} \text{I} \quad & j = 1, \dots, k, \quad z \in \delta_{\vec{x}_j} \\ (32) \quad & i^* = \arg \max_{i \in \delta_{\vec{x}_j}} \left\{ \ln(w_i^{(\nu)}) - B_{A^*}(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i, \vec{\zeta}_i^{(\nu)}) \right\}, \\ & \rho_j^{(\nu+1)}(z) = \delta_{i^*z}. \end{aligned}$$

Жесткая аппроксимация $\rho_j^{(\nu+1)}(z)$ (32) приводит к однозначной ассоциации отсчетов \vec{x}_j с узлами сетки $\vec{\mu}_{i^*}$, или, что эквивалентно, разбиению отсчетов выборки $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ на K непересекающихся подгрупп $\{X_{k_z}^{(\nu+1)} = (\vec{x}_{j_1}, \dots, \vec{x}_{j_{k_z}})\}$, где k_z — число отсчетов \vec{x}_j объединенных в группу $X_{k_z}^{(\nu+1)}$ согласно ассоциации $\rho_j^{(\nu+1)}(z) = 1$ (некоторые из $X_{k_z}^{(\nu+1)}$ могут быть пустыми). В терминах результирующего разбиения вычисления на шаге **II** (29) также упрощаются и принимают вид

$$\begin{aligned} \text{II} \quad & z = 1, \dots, K \\ (33) \quad & w_z^{(\nu+1)} = \frac{k_z}{k}, \\ & \vec{\zeta}_z^{(\nu+1)} = \frac{1}{k_z} \sum_{\vec{x}_j \in X_{k_z}^{(\nu+1)}} (\vec{x}_j - \vec{\mu}_z). \end{aligned}$$

Интересно в этой связи отметить, что если исключить веса $\{w_z\}$ из числа параметров $\vec{\theta}$, предписав им равномерное распределение $w_z = 1/K$, то схема

жестких вычислений **I** (32)–**II** (33) принимает форму:

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{I} \quad j = 1, \dots, k, \quad z \in \delta_{\vec{x}_j} : \\
 & z = \arg \min_{i \in \delta_{\vec{x}_j}} \left\{ B_{A^*} \left(\vec{x}_j - \vec{\mu}_i, \vec{\zeta}_i^{(\nu)} \right) \right\}, \\
 & k_z = k_z + 1, \quad X_{k_z}^{(\nu+1)} = X_{k_z}^{(\nu+1)} \cup \vec{x}_j, \\
 (34) \quad & \mathbf{II} \quad z = 1, \dots, K : \\
 & \vec{\zeta}_z^{(\nu+1)} = \frac{1}{k_z} \sum_{\vec{x}_j \in X_{k_z}^{(\nu+1)}} \vec{x}_j - \vec{\mu}_z, \\
 & k_z = 0, \quad X_{k_z}^{(\nu+2)} = \emptyset.
 \end{aligned}$$

Схема (34) практически совпадает (с точностью до нюансов, обсужденных выше) с алгоритмом жесткой Брегмановской кластеризации (Bregman Hard Clustering) [23]. Интересно отметить, что там же приводится замечание о том, что при конкретных выборах дивергенции Брегмана $B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta})$ получаются популярные методы кластеризации. Именно, классический алгоритм K-средних (K-means), алгоритм LBG [24] и алгоритм теоретико-информационной кластеризации [50] являются частными случаями жесткой кластеризации, когда $B_{A^*}(\vec{\xi}, \vec{\zeta})$ имеет вид квадрата евклидова расстояния, расстояния Итакуры–Сайто или дивергенции Кульбака–Лейблера [39].

С целью продемонстрировать возможности кодирования и восстановления предложенными в работе генеративными автокодировщиками заданных выборочными представлениями изображений, был использован пример простых рецептивных полей гауссовского типа [42] (см. (24)):

$$\begin{aligned}
 (35) \quad \eta(\vec{\xi} | \vec{\zeta}) &= \frac{1}{2\pi D^2} \exp \left\{ -(\vec{\xi} - \vec{\zeta})^2 / 2D^2 \right\} = \exp \left\{ \vec{\xi}^T \vec{\nu} - A(\vec{\nu}) \right\} \rho_0(\vec{\xi}), \\
 \rho_0(\vec{\xi}) &= \frac{1}{2\pi D^2} \exp \left\{ -\vec{\xi}^2 / 2D^2 \right\}, \quad A(\vec{\nu}) = D^2 \vec{\nu}^2 / 2, \quad \vec{\zeta} = D^2 \vec{\nu}.
 \end{aligned}$$

На рис. 4 приведены результаты кодирования-восстановления изображения “CamelCam”, содержащего 1 000 000 отсчетов (рис. 2). Кодирование осуществлялось по схеме жесткой аппроксимации вычислений **I** (32)–**II** (33) с разбиением выборочного представления $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ на $K = l \times l$ непесекающихся сеточных кластеров $\left\{ X_{k_z}^{(\nu)} \subset \Delta_z \right\}$, соответствующих узлам прямоугольной сетки, размерами l узлов по вертикали и l узлов по горизонтали изображения Ω (рис. 3). Число итераций схемы полагалось равным $\nu_{\max} = 10$. По вычисленным в результате параметрам $\vec{\theta}^* = \left\{ \{w_z^*\}, \{\vec{\zeta}_z^*\} \right\}$ восстановление плотности распределения вероятностей отсчета $\vec{x} \in \Omega$ (совпадающей с нормированной интенсивностью $I(\vec{x})$ излучения на Ω в данном случае

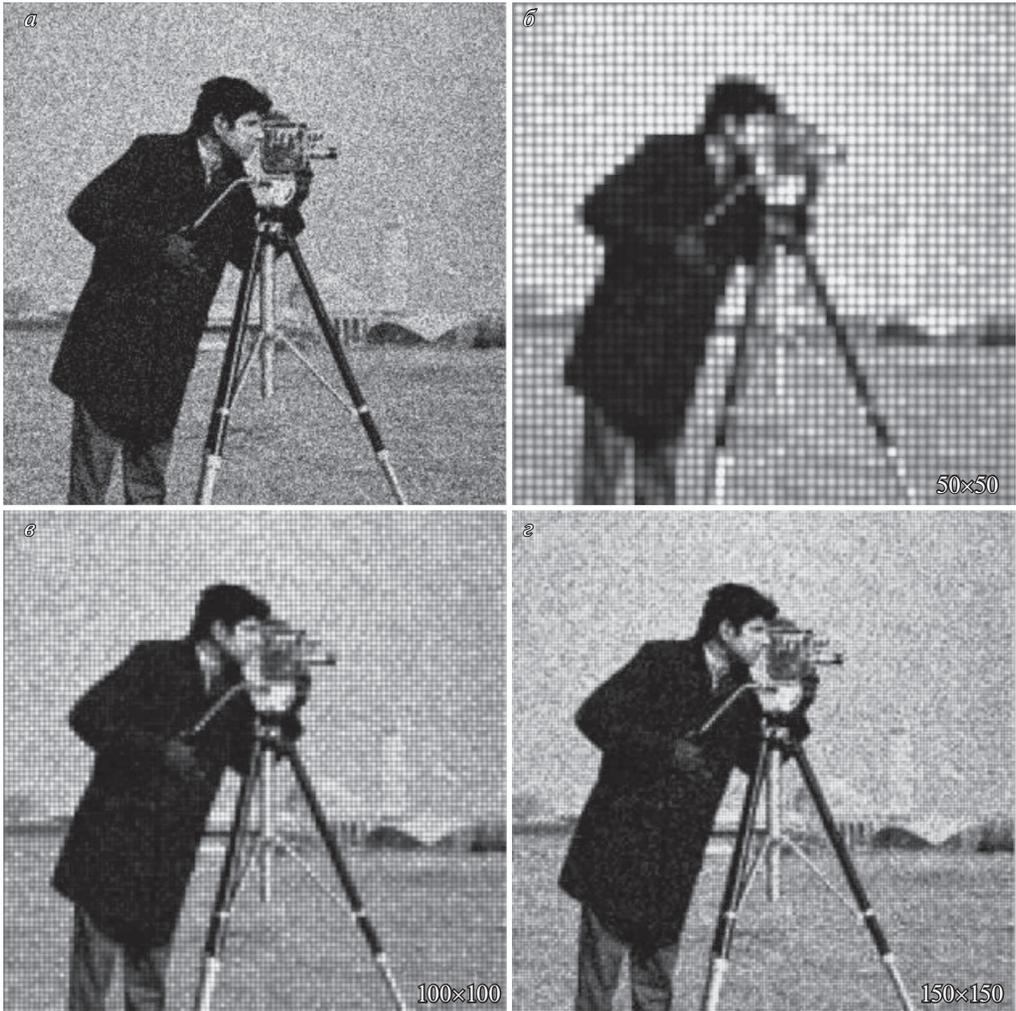


Рис. 4. Результаты кодирования–восстановления выборочного представления изображения “Самегаман”: *a* — выборочное представление размером 1 000 000 отсчетов как на рис. 2; *б, в, г* — восстановленные изображения, соответствующие сеткам в 50×50 , 100×100 и 150×150 узлов.

с нормированной битмап-картой исходного изображения “Самегаман”, см. рис. 2), осуществлялось в соответствии с (16), (24)

$$(36) \quad \rho(\vec{x}, \vec{\theta}^*) = \sum_{i \in \delta_{\vec{x}}} \frac{w_i^*}{2\pi D^2} \exp \left\{ -\frac{(\vec{x} - \vec{\mu}_i - \vec{\zeta}_z^*)^2}{2D^2} \right\}.$$

6. Заключение

Предложенная в работе концепция автокодировщиков, предназначенных для автоматической генерации сжатых изображений, оказалась содержатель-

ной в отношении открывающихся с ее помощью новых возможностей по синтезу реальных алгоритмов кодирования-восстановления изображений. Разработанное для этих целей специальное представление изображений с помощью выборок отсчетов (выборочных представлений) позволяет, с одной стороны, избежать связанных с идеальными изображениями проблем вычислительных ресурсов, а с другой стороны, открывает широкие возможности по адаптации методов машинного обучения к задачам, подобным рассмотренным в работе.

Основываясь на специфике выборочных представлений, удалось сформулировать генеративную (порождающую) модель автокодировщиков, которая почти автоматически выводит на такие разделы машинного обучения, как наивный байесов подход, методы максимального правдоподобия, итеративные алгоритмы типа EM-алгоритма поиска оценок максимально-правдоподобных оценок для смесей, алгоритмы кластеризации типа K-means, LBG алгоритмы векторного квантования и т.д. В этой связи в работе представлено несколько различающихся по сложности примеров итеративных алгоритмических схем кодирования-восстановления изображений.

Особенностью предложенных схем является активно используемая в них концепция рецептивных полей. Она позволяет эффективно обходить известные трудности итеративных алгоритмов, обрабатывающих смеси с большим числом компонент, например порядка 10^4 – 10^6 , что по порядку соответствует числу рецептивных полей в сетчатке глаза. Апелляция к зрительному восприятию здесь не случайна, поскольку, как подчеркнуто в работе, качеству восприятия изображений и адаптации механизмов зрительного восприятия человека к задачам цифровой обработке изображений сегодня уделяется повышенное внимание.

В связи с изложенным выше отметим, что практически все приведенные в работе алгоритмы были численно апробированы, проведенные эксперименты подтвердили их эффективность по отношению к памяти и времени вычисления. К примеру, выбранные для иллюстрации отсчетные изображения “Cameman” (см. рис. 2) потребовали на вычисление восстановленных изображений времени менее секунды даже в случае наиболее плотной сетки в 150×150 узлов (22 500 компонент).

В целом, основываясь на полученных результатах, хотелось бы выразить надежду, что предложенные в работе подходы найдут в ближайшее время как дальнейшее теоретическое развитие, так и плодотворное использование в прикладных задачах.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Асимптотический вид апостериорного распределения параметров для выборки k независимых, одинаково распределенных (iid) отсчетов

Пусть дана выборка из k независимых одинаково распределенных (iid) случайных отсчетов $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$, плотность распределения вероятностей

каждого из которых определяется некоторым элементом параметрического семейства $G = \left\{ \rho(\vec{x} \mid \vec{\theta}) \right\}$, $\vec{x} \in \Omega$, $\vec{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^p$. Пусть существует точка $\vec{\theta}_{ML} \in \Theta$, в которой имеет место максимум по $\vec{\theta}$ логарифма функции правдоподобия совместной плотности распределения отсчетов X_k

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{\theta}} L(\vec{\theta}_{ML}; X_k) &= \vec{0}, \\ \text{(П.1)} \quad L(\vec{\theta}; X_k) &= \ln(\rho(X_k \mid \vec{\theta})) = \ln \left(\prod_{j=1}^k \rho(\vec{x}_j \mid \vec{\theta}) \right). \end{aligned}$$

Запишем в окрестности $\vec{\theta}_{ML}$ тейлоровское разложение логарифма функции правдоподобия (П.1):

$$\text{(П.2)} \quad L(\vec{\theta}; X_k) = L(\vec{\theta}_{ML}; X_k) + \frac{1}{2}(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \left(\frac{\partial^2 L(\vec{\theta}_{ML}; X_k)}{\partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q} \right) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}) + \dots$$

На основании (П.1) для матрицы вторых частных производных в (П.2) можно записать следующее представление

$$\text{(П.3)} \quad \left(\frac{\partial^2 L(\vec{\theta}_{ML}; X_k)}{\partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q} \right) = k \left(\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \frac{\partial^2 \ln \rho(\vec{x}_j \mid \vec{\theta}_{ML})}{\partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q} \right).$$

Рассматривая вторые производные $\partial^2 \ln \rho(\vec{x}_j \mid \vec{\theta}_{ML}) / \partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q$ в (П.3) как случайные величины — функции от случайных \vec{x}_j , можно асимптотически при $k \gg 1$ заменить выборочное среднее в правой части (П.3) соответствующим средним по распределению $\rho(\vec{x} \mid \vec{\theta})$

$$\text{(П.4)} \quad \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \frac{\partial^2 \ln \rho(\vec{x}_j \mid \vec{\theta}_{ML})}{\partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q} \simeq \int \rho(\vec{x} \mid \vec{\theta}) \frac{\partial^2 \ln \rho(\vec{x} \mid \vec{\theta}_{ML})}{\partial \vec{\theta}_p \partial \vec{\theta}_q} d\vec{x}.$$

Если учесть асимптотическую несмещенность $\vec{\theta}_{ML} \sim \vec{\theta}$, то нетрудно заметить, что правая часть (П.4) представляет собой с точностью до знака информационную матрицу Фишера $\mathfrak{S}(\vec{\theta})$ распределения $\rho(\vec{x} \mid \vec{\theta})$. Подставляя (П.4) в (П.3), а затем в (П.2), получаем следующую форму разложения логарифмической функции правдоподобия

$$\text{(П.5)} \quad L(\vec{\theta}; X_k) \simeq L(\vec{\theta}_{ML}; X_k) - \frac{k}{2}(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \mathfrak{S}(\vec{\theta})(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}).$$

Экспонирование (П.5) дает асимптотику самой функции правдоподобия

$$\text{(П.6)} \quad \rho(X_k \mid \vec{\theta}) \simeq \rho(X_k \mid \vec{\theta}_{ML}) \exp \left\{ -\frac{k}{2}(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \mathfrak{S}(\vec{\theta})(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}) \right\}.$$

От $\vec{\theta}$ в правой части (П.6) зависит только экспоненциальный сомножитель, поскольку $\vec{\theta}_{ML}$ в первом сомножителе является функцией от $X_k = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ и от $\vec{\theta}$ не зависит. Следовательно, поведение $\rho(X_k | \vec{\theta})$ в зависимости от $\vec{\theta}$ определяется только квадратичной формой в экспоненте с большим коэффициентом $k \gg 1$. Отсюда асимптотически $\rho(X_k | \vec{\theta})$ имеет острый пик в точке $\vec{\theta}_{ML}$, что может быть использовано для вычисления других распределений. Например, предполагая некоторое априорное распределение параметров $P(\vec{\theta})$, более широкое, чем $\rho(X_k | \vec{\theta})$, можно последовательно найти

$$(П.7) \quad \rho(X_k) = \int_{\Theta} \rho(X_k | \vec{\theta}) P(\vec{\theta}) d\vec{\theta} \approx \rho(X_k | \vec{\theta}_{ML}) C(\vec{\theta}_{ML}) P(\vec{\theta}_{ML}),$$

$$C(\vec{\theta}_{ML}) = \int_{\Theta} \exp \left\{ -\frac{k}{2} (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \mathfrak{S}(\vec{\theta}) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}) \right\} d\vec{\theta},$$

а затем

$$(П.8) \quad \rho(\vec{\theta} | X_k) = \frac{\rho(X_k | \vec{\theta}) P(\vec{\theta})}{\rho(X_k)} \approx$$

$$\approx \frac{1}{C(\vec{\theta}_{ML})} \frac{P(\vec{\theta})}{P(\vec{\theta}_{ML})} \exp \left\{ -\frac{k}{2} (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \mathfrak{S}(\vec{\theta}) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}) \right\} \approx$$

$$\approx \frac{1}{C(\vec{\theta}_{ML})} \exp \left\{ -\frac{k}{2} (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})^T \mathfrak{S}(\vec{\theta}) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML}) \right\},$$

что представляет собой узкое, гауссова типа распределение, стремящееся к $\delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_{ML})$ -функции Дирака при $k \rightarrow \infty$.

Приближение седловой точки для аппроксимации плотности распределения вероятностей случайной векторной величины

Приближение седловой точки является хорошо известным инструментом в статистике и достаточно широко используется при асимптотической аппроксимации поведения выборочного среднего большого числа k независимых, одинаково распределенных случайных величин [51]. Для анализа распределений отдельных случайных величин данное приближение используется существенно реже [43]. Ниже, с целью адаптации к рассматриваемым задачам метода седловой точки в случае одной (векторной) случайной величины, приводятся основные шаги обоснования этого приближения.

Пусть случайный вектор $\vec{\xi}$ задан на некоторой области $\Delta \subset \mathbb{R}^2$, являющейся носителем плотности распределения вероятностей $\rho_0(\vec{\xi})$. Для простоты будем полагать плотность симметричной, финитной функцией, так что носитель $\Delta = \{ \vec{\xi} | \rho_0(\vec{\xi}) > 0 \}$ является открытым, ограниченным, симметричным относительно начала координат множеством в \mathbb{R}^2 . В этом случае для любых

(в том числе комплексных) векторов $\vec{v} \in \mathbb{C}^2$ существует двумерное преобразование Лапласа плотности $\rho_0(\vec{\xi})$ [52], которое может быть представлено в виде

$$(II.9) \quad F(\vec{v}) = \int_{\Delta} \exp(-\vec{\xi}^T \vec{v}) \rho_0(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \int_{\Delta} \exp(\vec{\xi}^T \vec{v}) \rho_0(\vec{\xi}) d\vec{\xi},$$

где использован тот факт, что для симметричных $\rho_0(\vec{\xi})$ и Δ преобразование Лапласа $F(\vec{v})$ также симметрично.

Плотность $\rho_0(\vec{\xi})$ в свою очередь может быть выражена с помощью обратного преобразования Лапласа [52] от $F(\vec{v})$ (II.9)

$$(II.10) \quad \begin{aligned} \rho_0(\vec{\xi}) &= \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp(\vec{\xi}^T \vec{v}) F(\vec{v}) d\vec{v} = \\ &= \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp(A(\vec{v}) - \vec{\xi}^T \vec{v}) d\vec{v}, \end{aligned}$$

где i — мнимая единица, $A(\vec{v}) = \ln F(\vec{v})$ — производящая функция кумулянтов. В (II.10) также использован факт симметричности $\rho_0(\vec{\xi})$.

Интеграл в (II.10) можно приближенно найти с помощью метода седловой точки, если деформировать путь интегрирования так, чтобы он прошел через (седловую) точку $\vec{v}_{\vec{\xi}}$, обращающую градиент $(A(\vec{v}) - \vec{\xi}^T \vec{v})$ в ноль: $\nabla A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) = \vec{\xi}$. При этом, разлагая показатель экспоненты в (II.10) с точностью до членов второго порядка по $(\vec{v} - \vec{v}_{\vec{\xi}})$, можно получить следующий приближенный результат:

$$(II.11) \quad \begin{aligned} \rho_0(\vec{\xi}) &\approx \frac{\exp(A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) - \vec{\xi}^T \vec{v}_{\vec{\xi}})}{(2\pi i)^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp \left\{ \frac{1}{2} (\vec{v} - \vec{v}_{\vec{\xi}})^T \left[\nabla \nabla^T A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) \right] (\vec{v} - \vec{v}_{\vec{\xi}}) \right\} d\vec{v} = \\ &= \frac{\exp(A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) - \vec{\xi}^T \vec{v}_{\vec{\xi}})}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\vec{\eta} + i\vec{v}_{\vec{\xi}})^T \left[\nabla \nabla^T A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) \right] (\vec{\eta} + i\vec{v}_{\vec{\xi}}) \right\} d\vec{\eta} = \\ &= \frac{\exp \left\{ A(\vec{v}_{\vec{\xi}}) - \vec{\xi}^T \vec{v}_{\vec{\xi}} \right\}}{2\pi \sqrt{\det \nabla \nabla^T A(\vec{v}_{\vec{\xi}})}}, \end{aligned}$$

где переход к гауссовому интегралу осуществлен в результате замены переменных интегрирования $\vec{v} = i\vec{\eta}$.

Учитывая, что выражение в числителе (П.11) с точностью до знака совпадает со значением сопряженной по Лежандру к $A(\vec{\nu})$ функции $A^*(\vec{\xi})$ [43]

$$(П.12) \quad A^*(\vec{\xi}) = \vec{\xi}^T \vec{\nu}_{\vec{\xi}} - A(\vec{\nu}_{\vec{\xi}}), \quad \nabla A(\vec{\nu}_{\vec{\xi}}) = \vec{\xi},$$

и тот факт, что $A(\vec{\nu})$ и $A^*(\vec{\xi})$ имеют взаимно обратные матрицы Гесса: $\nabla \nabla^T A^*(\vec{\xi}) = [\nabla \nabla^T A(\vec{\nu}_{\vec{\xi}})]^{-1}$ получим приближение седловой точки для плотности $\rho_0(\vec{\xi})$ [43]

$$(П.13) \quad \rho_0(\vec{\xi}) \approx \frac{\sqrt{\det \nabla \nabla^T A^*(\vec{\xi})}}{2\pi} \exp \left\{ -A^*(\vec{\xi}) \right\}.$$

Соотношение (П.13) можно переписать в эквивалентном виде

$$(П.14) \quad \rho_0(\vec{\xi}) \exp \left\{ A^*(\vec{\xi}) \right\} \approx \frac{1}{2\pi} \sqrt{\det \nabla \nabla^T A^*(\vec{\xi})},$$

который позволяет записать приближенное выражение для левой части через квадратный корень из определителя матрицы Гесса $\nabla \nabla^T A^*(\vec{\xi})$.

Дальнейшее приближение может быть получено, если вспомнить, что $A(\vec{\nu})$ является производящей функцией кумулянтов для $\rho_0(\vec{\xi})$. Это значит, что $\nabla \nabla^T A(\vec{0}) = R_0$ — корреляционная функция $\rho_0(\vec{\xi})$, определитель которой приближенно равен квадрату площади Δ . Тем самым $[\det \nabla \nabla^T A^*(\vec{0})]^{-1} = \det \nabla \nabla^T A(\vec{0}) = \det R_0 \approx |\Delta|^2 \approx D^4$, где D — характерный размер Δ . Полагая $\det \nabla \nabla^T A^*(\vec{\xi}) \approx \det \nabla \nabla^T A^*(\vec{0}) \approx D^{-4}$, можно приблизить правую часть (П.14) следующим выражением:

$$(П.15) \quad \rho_0(\vec{\xi}) \exp \left\{ A^*(\vec{\xi}) \right\} \approx \frac{1}{2\pi D^2}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ezhilraman V., Srinivasan S.* State of the art in image processing & big data analytics: issues and challenges // International J. of Engineering & Technology. 2018. V. 7. P. 195–199. <https://doi.org/10.14419/ijet.v7i2.33.13885>
2. *Bull D.R., Zhang F.* Intelligent image and video compression: communicating pictures. 2nd ed. London: Academic Press, 2021.
3. *Zeyu Y., Fei W., Rendong Y., et al.* On Perceptual Lossy Compression: The Cost of Perceptual Reconstruction and An Optimal Training Framework // Proc. of the 38-th International Conference on Machine Learn., PMLR. 2021. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.02782>
4. *Shannon C.E.* Coding Theorems for a Discrete Source with a Fidelity Criterion – Institute of Radio Engineers, International Convention Record. V. 7, 1959 // in C.E. Shannon: Collected Papers. 1993. P. 325–350. <https://doi.org/10.1109/9780470544242.ch21>

5. *Tschannen M., Agustsson E., Lucic M.* Deep Generative Models for Distribution-Preserving Lossy Compression // Proc. of the 32nd International Conference on Neural Inform. Processing Systems (NIPS). 2018. P. 5933–5944.
6. *Blau Y., Michaeli T.* Rethinking Lossy Compression: The Rate–Distortion–Perception Tradeoff // Proc. of the 36th International Conference on Machine Learn., PMLR. 2019. V. 97. P. 675–685.
7. *Matsumoto R.* Introducing the perception–distortion tradeoff into the rate–distortion theory of general information sources // IEICE Commun. Express. 2018. V. 7. No. 11. P. 427–431. <https://doi.org/10.1587/comex.2018XBL0109>
8. *Wang Z., Bovik A., Sheikh H., Simoncelli E.* Image quality assessment: from error visibility to structural similarity // IEEE Trans. Image Process. 2004. V. 13. No. 4. P. 600–612. <https://doi.org/10.1109/TIP.2003.819861>
9. *Wang Z., Bovik A.* Video quality assessment based on structural distortion measurement // Signal processing. Image commun. 2004. V. 19. No. 2. P. 121–132. [https://doi.org/10.1016/S0923-5965\(03\)00076-6](https://doi.org/10.1016/S0923-5965(03)00076-6)
10. *Sheikh H., Bovik A., de Veciana G.* An information fidelity criterion for image quality assessment using natural scene statistics // IEEE Trans. on image processing. 2005. V. 14. No. 12. P. 2117–2128. <https://doi.org/10.1109/TIP.2005.859389>
11. *Larson E.C., Chandler D.M.* Most apparent distortion: full–reference image quality assessment and the role of strategy // J. Electron. Imaging. 2010. V. 19. No. 1. P. 011006–011006. <https://doi.org/10.1117/1.3267105>
12. *Bishop C.M., Lasserre J.* Generative or Discriminative? Getting the Best of Both Worlds // Bayes. Statist. 2007. V. 8. P. 3–24.
13. *Goodfellow I., Pouget–Abadie J., Mirza M., et al.* Generative Adversarial Networks // Commun. ACM. 2020. V. 63. No. 11. P. 139–144. <https://doi.org/10.1145/3422622>
14. *Kingma D.P., Welling M.* Auto–Encoding Variational Bayes // arXiv:1312.6114. arxiv.org. 2013.
15. *Hinton G.E., Osindero S., The Y.-W.* A Fast-Learning Algorithm for Deep Belief Nets // Neural Computation. 2006. V. 18. No. 7. P. 1527–1554. <https://doi.org/10.1162/neco.2006.18.7.1527>
16. *Hassabis D., Kumaran D., Summerfield C., Botvinick M.* Neuroscience-Inspired Artificial Intelligence // Neuron. 2017. V. 95. No. 2. P. 245–258. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2017.06.011>
17. *Antsiperov V.E.* Representation of Images by the Optimal Lattice Partitions of Random Counts // Patt. Recogn. and Image Anal. 2021. V. 31. No. 3. P. 381–393. <https://doi.org/10.1134/S1054661821030044>
18. *Antsiperov V.E., Kershner V.A.* Image Coding by Count Sample, Motivated by the Mechanisms of Light Perception in the Visual System // Commun. Comput. Inform. Sci. 2022. V. 1534. P. 715–729. https://doi.org/10.1007/978-3-030-96040-7_54
19. *Scott D.W.* Multivariate Density Estimation. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc. 1992. <https://doi.org/10.1002/9780470316849>
20. *Rufo M.J., Martin J., Perez C.J.* Bayesian analysis of finite mixture models of distributions from exponential families // Comput. Statist. 2006. V. 21. No. 3–4. P. 621–637. <https://doi.org/10.1007/s00180-006-0018-8>

21. *McLachlan G.J., Krishnan T.* The EM Algorithm and Extensions. 2nd ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc. 2007.
22. *Tzikas D., Likas A., Galatsanos N.* The variational approximation for Bayesian inference // IEEE Signal Proc. Magazine. 2008. V. 25. No. 6. P. 131–146.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1109/msp.2008.929620>
23. *Banerjee A., Merugu S., Dhillon I.S., Ghosh J.* Clustering with Bregman Divergences // J. Machine Learn. Res. 2005. V. 6. P. 1705–1749.
<https://doi.org/10.1137/1.9781611972740.22>
24. *Linde Y., Buzo A., Gray R.M.* An algorithm for vector quantizer design // IEEE Trans. Commun. 1980. V. 28. No. 1. P. 84–95.
<https://doi.org/10.1109/TCOM.1980.1094577>
25. *Lloyd S.* Least squares quantization in PCM // IEEE Trans Inform. Theory. 1982. V. 28. No. 2. P. 129–137. <https://doi.org/10.1109/TIT.1982.1056489>
26. *Kohonen T.* Self-Organized Formation of Topologically Correct Feature Maps // Biolog. Cybernet. 1982. V. 43. No. 1. P. 59–69. <https://doi.org/10.1007/bf00337288>
27. *Barrett H.H., Myers K.J.* Foundations of image science. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc. 2004.
28. *Fossum E.* The Invention of CMOS Image Sensors: A Camera in Every Pocket // 2020 Pan Pacific Microelectronics Symposium (Pan Pacific). 2020. P. 1–6.
<https://doi.org/10.23919/PanPacific48324.2020.9059308>
29. *Gabriel C.G., Perrinet L., Keil M.* Biologically Inspired Computer Vision: Fundamentals and Applications. Weinheim: Wiley-VCH. 2015.
30. *Fox M.* Quantum Optics: An Introduction. Oxford, New York: Oxford University Press, 2006.
31. *Streit R.L.* Poisson Point Processes. Imaging, Tracking and Sensing. New York: Springer. 2010.
32. *Bertero M., Boccacci P., Desidera G., Vicidomini G.* Image deblurring with Poisson data: from cells to galaxies // Inverse Problems. 2009. V. 25. No. 12. P. 123006.
<https://doi.org/10.1088/0266-5611/25/12/123006>
33. *Robert C.P., Casella G.* Monte Carlo Statistical Methods. 2nd ed. New York: Springer-Verlag. 2004. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-4145-2>
34. *Hinton G.E., Zemel R.S.* Autoencoders, minimum description length and Helmholtz free energy // Proc. of the 6th International Conference on Neural Inform. Processing Systems (NIPS'93). 1993. P. 3–10.
35. *Goodfellow I., Bengio Y., Courville A.* Autoencoders // Deep Learning. MIT Press. 2016.
36. *Baldi P.* Autoencoders, unsupervised learning and deep architectures // JMLR: Workshop and Conference Proceedings. 2012. V. 27. P. 37–49.
37. *Alain G., Bengio Y., Yao L., et.al.* GSNs: Generative Stochastic Networks // arXiv:1503.05571. arXiv.org. 2015.
38. *Aldrich J. R.A.* Fisher and the Making of Maximum Likelihood 1912–1922 // Statistical Science. 1997. V. 12. No. 3. P. 162–176.
39. *Van Erven T.T., Harremoës P.* Renyi Divergence and Kullback-Leibler Divergence // IEEE Trans. on Inform. Theory. 2014. V. 60. No. 7. P. 3797–3820.
<https://doi.org/10.1109/TIT.2014.2320500>

40. *Schiller P.H., Tehovnik E.J.* Vision and the Visual System // Oxford: Oxford University Press. 2015. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199936533.001.0001>
41. *Cooler S., Schwartz G.W.* An offset ON-OFF receptive field is created by gap junctions between distinct types of retinal ganglion cells // *Nat Neurosci.* 2021. V. 24. P. 105–115. <https://doi.org/10.1038/s41593-020-00747-8>
42. *Young R.A.* Oh say, can you see? The physiology of vision // *Proc. of SPIE.* 1991. V. 1453. No. 1. P. 92–123. <https://doi.org/10.1117/12.44348>
43. *McCullagh P.* Tensor methods in statistics. London, New York: Chapman and Hall/CRC. 1987. <https://doi.org/10.1201/9781351077118>
44. *Brown L.D.* Fundamentals of Statistical Exponential Families // Hayward IMS. 1986.
45. *Frigyik A.B., Srivastava S., Gupta M.R.* Functional Bregman divergence // *IEEE Int. Symposium on Inform. Theory.* 2008. P. 1681–1685. <https://doi.org/10.1109/ISIT.2008.4595274>
46. *Rheinboldt W.C.* Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations. 2nd ed. Society for Industrial and Applied Mathematics. 1998.
47. *Ortega J.M., Rheinboldt W.C.* Iterative solution of nonlinear equations in several variables. Society for Industrial and Applied Mathematics. 2000.
48. *Redner R.A., Walker H.F.* Mixture Densities, Maximum Likelihood and the EM Algorithm // *SIAM Review.* 1984. V. 26. No. 2. P. 195–239. <https://doi.org/10.1137/1026034>
49. *Bridle J.S.* Probabilistic Interpretation of Feedforward Classification Network Outputs, with Relationships to Statistical Pattern Recognition // *Neurocomputing.* 1990. V. 68. P. 227–236. https://doi.org/10.1007/978-3-642-76153-9_28
50. *Dhillon I., Mallel S., Kumar R.* A divisive information–theoretic feature clustering algorithm for text classification // *J. of Machine Learn. Res.* 2003. V. 3. No. 4. P. 1265–1287. <https://doi.org/10.1162/153244303322753661>
51. *Reid N.* Saddlepoint Methods and Statistical Inference // *Statistical Science.* 1988. V. 3. No. 2. P. 213–227. <https://doi.org/10.1214/ss/1177012906>
52. *Ditkin V.A., Prudnikov A.P.* Operational calculus in two variables and its applications. New York: Dover Publications, Inc. 2017.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Лазаревым.

Поступила в редакцию 02.02.2022

После доработки 24.06.2022

Принята к публикации 29.06.2022

Управление в технических системах

© 2022 г. В.В. КЛИМЧЕНКО, канд. техн. наук (volk@iacp.dvo.ru),
О.Ю. СНЕГИРЕВ (snegirevoleg@iacp.dvo.ru),
С.А. ШЕВЛЯГИНА, канд. техн. наук (samotylova@dvo.ru),
А.Ю. ТОРГАШОВ, д-р техн. наук (torgashov@iacp.dvo.ru)
(Институт автоматике и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

РАЗРАБОТКА АДАПТИВНОГО ВИРТУАЛЬНОГО АНАЛИЗАТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГНОЗИРУЮЩЕГО ФИЛЬТРА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА¹

Предлагается процедура построения адаптивного виртуального анализатора на примере анализатора для нестационарного массообменного технологического процесса. Точность прогноза выходных характеристик процесса максимизируется (минимизируется среднеквадратичная ошибка) за счет прогноза ошибки модели процесса, который используется как поправка к оценке характеристики процесса. В случае равноотстоящих по времени измерений характеристик процесса в качестве критерия для адаптации используется мера близости распределения спектра ошибок к равномерному. Такой критерий по сути является “мерой близости” модели процесса к оптимальной. Преимущество предлагаемого критерия по сравнению с традиционными, измеряющими характеристики разброса ошибок, состоит в том, что изменения характеристик разброса ошибок модели могут быть вызваны причинами, не связанными с адекватностью модели. При неравноотстоящих измерениях отыскиваются амплитуды гармонических составляющих процесса, что позволяет восстановить значения характеристик процесса в равноотстоящие моменты времени при помощи обратного преобразования Фурье. Такой подход, в отличие от традиционно применяемой интерполяции, не искажает спектр рассматриваемого процесса.

Ключевые слова: виртуальный анализатор, идентификация, адаптация, реакционно-ректификационный процесс, критерий Колмогорова.

DOI: 10.31857/S0005231022120108, **EDN:** КТВТУЛ

1. Введение

В связи с развитием автоматизации производства и повышением производительности потребность в виртуальном мониторинге производственной

¹ Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Государственного фонда естественных наук Китая в рамках научного проекта № 21-57-53005.

ситуации с целью формирования оптимального управления является актуальной задачей [1–3]. В настоящее время виртуальные анализаторы (ВА) рассматриваются как интеллектуальная основа оперативных систем управления производством и могут быть реализованы на нескольких уровнях: самостоятельно в виде надстройки; в контуре управления АСУ ТП; интегрированы в систему усовершенствованного управления технологическим процессом (ТП) [4].

ВА позволяют оценить важные и трудно поддающиеся количественной оценке переменные (показатели качества конечных продуктов) с использованием имеющихся технологических параметров [5]. Для разработки ВА требуется большая база данных ТП и эффективный метод обучения. В последнее время наблюдается заметный рост исследований по разработке статических моделей, входящих в состав ВА, для оценки необходимых показателей ТП. Однако нелинейность массообменных технологических объектов, возникающая из-за изменения сырья, дезактивации катализатора и т.д. [6], приводит к тому, что данные, полученные ранее, уже не соответствуют текущему режиму ТП к моменту вычисления прогноза [7]. В связи с нестационарностью ТП, характерной для реакционно-ректификационных процессов и массообменных технологических объектов (МТО) в целом, широкое распространение получили подходы к разработке адаптивных ВА на основе “движущегося окна” [8–10]. Однако резкие изменения, возникающие из-за неизмеряемых параметров ТП, приводят к существенному снижению точности разработанных ВА [9].

В связи с этим для равноотстоящих по времени измерений выходной переменной предлагается подход к разработке адаптивного ВА с использованием критерия Колмогорова в качестве критерия адаптации. Статистически значимое отклонение спектральной плотности последовательности ошибок прогноза от постоянной, выявленное при помощи критерия Колмогорова, выполняет функцию сигнала о корректировке ВА в процессе адаптации, а также позволяет разделять полученные ранее данные на “устаревшие” и “актуальные”.

В случае различных временных интервалов между наблюдениями, что нарушает исходные предположения, принимаемые при использовании аппарата статистического анализа и прогнозирования временных рядов, предлагается процедура изменения интервала дискретизации, основанная на вычислении амплитуд всех гармонических функций, составляющих данный временной ряд. Использование предлагаемого подхода позволяет избежать искажения спектральной плотности процесса, являющейся основой для построения моделей.

2. Описание технологического объекта и постановка задачи

Рассматривается реакционно-ректификационный процесс на примере производства высокооктановой добавки бензинов — метил-трет-бутилового эфи-

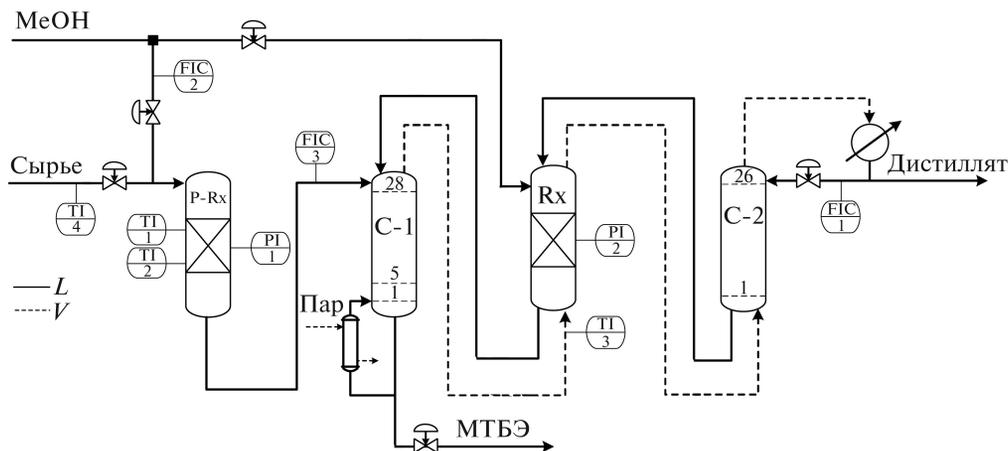


Рис. 1. Схема технологического процесса производства метил-трет-бутилового эфира.

ра (МТБЭ). Технологическая схема производства МТБЭ представлена на рис. 1 (прямой линией изображен поток жидкости — L , пунктирной линией представлен паровой поток — V).

В процессе синтеза МТБЭ имеется побочная реакция образования метил-втор-бутилового эфира (МВБЭ). В зависимости от способа организации процесса МВБЭ либо не образуется вовсе, либо его выход доходит до 2,36%. По физико-химическим показателям МТБЭ должен соответствовать требованиям и нормам, и содержание МВБЭ не должно превышать 1,5%.

При построении адаптивного ВА для оценки концентрации МВБЭ в МТБЭ(y), масс. %, в качестве входных переменных использовались:

- $u^{(1)}$ — время измерения t , ч;
- $u^{(2)}$ — расход орошения в C-2 (FIC1), м³/ч;
- $u^{(3)}$ — расход метанола в P-Rx (FIC2), м³/ч;
- $u^{(4)}$ — расход реакционной смеси в C-1 (FIC3), м³/ч;
- $u^{(5)}$ — давление в P-Rx (PI1), кгс/м²;
- $u^{(6)}$ — давление в Rx (PI2), кгс/м²;
- $u^{(7)}$ — температура в P-Rx (TI1), °C;
- $u^{(8)}$ — температура в P-Rx (TI2), °C;
- $u^{(9)}$ — температура паров из C-1 (TI3), °C;
- $u^{(10)}$ — температура сырья в P-Rx (TI4), °C.

Для набора данных $D = \{U, Y\}$, $Y = [y_r]$ — вектор выходной переменной размера $N \times 1$, $U = [u_r^{(k)}]$ — матрица размера $N \times p$, где $u_r^{(k)}$ — значения k -й входной переменной при r -м измерении, $y_r = y(t)$ можно представить в виде выражения

$$(1) \quad y(t) = \hat{y}(t) + e(t),$$

где ошибка, определяется как

$$(2) \quad e(t) = y(t) - \hat{y}(t).$$

Выход разработанной модели для оценки необходимого показателя технологического процесса можно представить как

$$(3) \quad \hat{y}(t) = f_1(U(t)),$$

где f_1 — аппроксимирующая функция.

В качестве критерия для оценки точности построенной модели используется среднеквадратическая ошибка СКО:

$$(4) \quad \text{СКО} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (Y(t) - f_1(U(t)))^2.$$

Основная задача заключается в минимизации значений СКО:

$$(5) \quad \text{СКО}(f_1(U(t))) \rightarrow \min.$$

Для адаптации ВА и минимизации СКО предлагается применять критерий Колмогорова, используемый как мера отклонения эмпирической функции распределения ординат периодограммы ошибок прогноза от теоретической.

3. Предлагаемый подход к разработке адаптивной модели в составе виртуального анализатора для оценки качества конечного продукта технологического процесса

Построение адаптивного ВА для предсказательного моделирования реакционно-ректификационных процессов можно схематично представить в виде рис. 2.

3.1. Инициализация алгоритма

Параметрам алгоритма присваиваются начальные значения: α — уровень значимости для проверки гипотезы об адекватности модели экстраполятора, используемой при прогнозировании выходной характеристики МТО; N_0 — начальное количество измерений входов и выходов МТО, используемых для построения прогнозирующей модели; N_b — размер буфера для аккумулялирования измерений, поступающих в процессе функционирования МТО.

3.2. Изменение интервала дискретизации

В условиях неравноотстоящих по времени измерений выходной переменной традиционно применяется полиномиальная (чаще всего линейная или

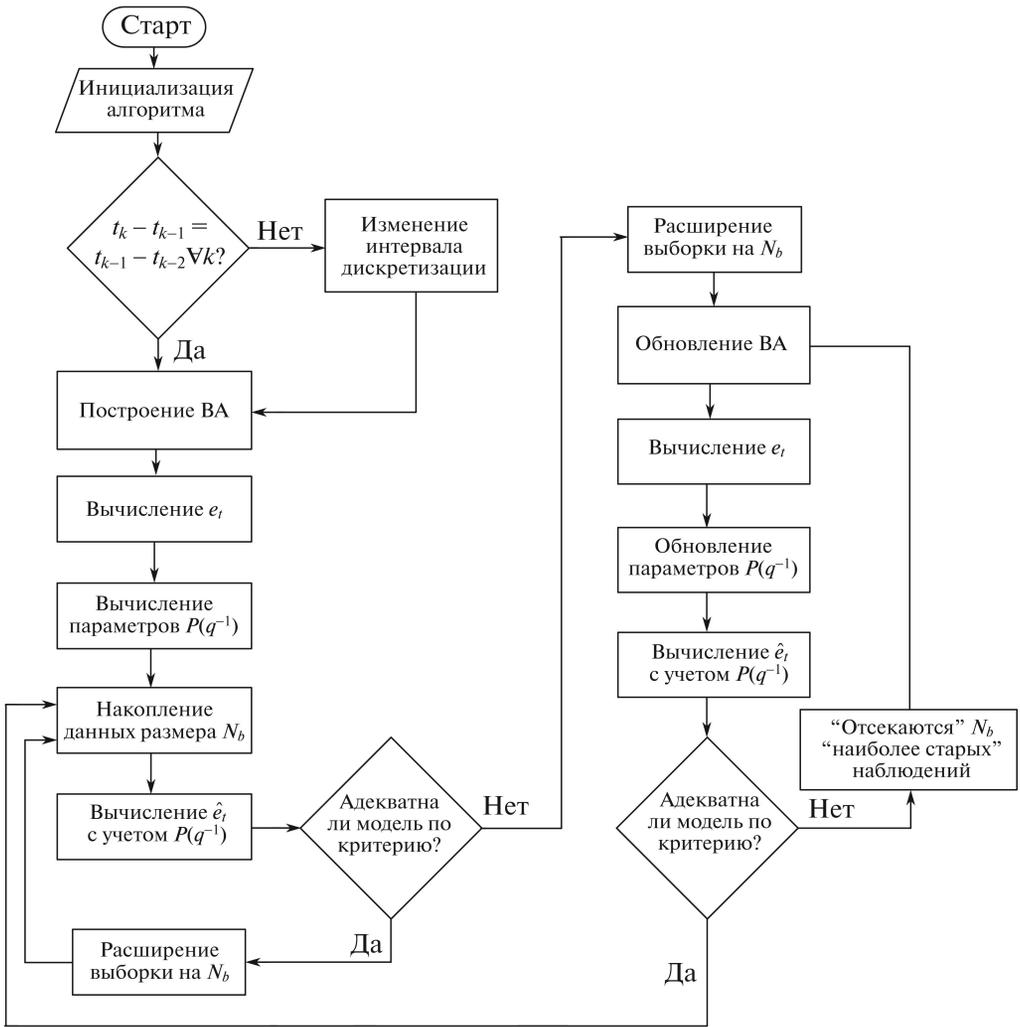


Рис. 2. Схема построения адаптивного виртуального анализатора.

квадратичная) или какая-либо еще интерполяция между близлежащими по времени значениями процесса. Такие подходы обладают критическим недостатком: они искажают спектральную плотность процесса, являющуюся основой для построения прогнозирующих моделей. Для преодоления подобных недостатков предлагается следующий подход.

Пусть процесс x_t , $t = 0, 1, \dots, N - 1$ в результате преобразования Фурье может быть представлен в виде линейной комбинации синусоид и косинусоид гармонических частот со своими амплитудами:

$$(6) \quad x_t = A_0 + 2 \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ A_m \cos \left(\frac{2\pi}{N} mt \right) + B_m \sin \left(\frac{2\pi}{N} mt \right) \right\} + A_n \cos \left(\frac{2\pi}{N} nt \right),$$

где $t = 0, 1, \dots, N - 1$, m — номер гармоники, A_m, B_m — амплитуды косинусоиды и синусоиды частоты $2\pi m/N$, $n = N/2$, если N четно. Если N нечетно ($N = 2n - 1$), то $n = (N + 1)/2$ и в этой формуле отсутствует последнее слагаемое (гармоника с амплитудой A_n).

Для целочисленных моментов времени амплитуды косинусоиды и синусоиды частоты $2\pi m/N$ определяются по формулам:

$$A_m = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} x_t \cos\left(\frac{2\pi}{N}mt\right), \quad B_m = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} x_t \sin\left(\frac{2\pi}{N}mt\right), \quad m = 0, 1, \dots, n.$$

В случае известных значений $x(\tau)$, где τ не является целым числом, можно воспользоваться непрерывностью гармонических функций и выразить $x(\tau)$ через их амплитуды:

$$x(\tau) = A_0 + 2 \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ A_m \cos\left(\frac{2\pi}{N}m\tau\right) + B_m \sin\left(\frac{2\pi}{N}m\tau\right) \right\} + A_n \cos\left(\frac{2\pi}{N}n\tau\right).$$

Имея N различных значений $x(\tau)$, составим систему N уравнений, из которой можно найти амплитуды всех гармонических частот $A_m, m = 0, 1, \dots, n; B_m, m = \overline{1, (n-1)}$:

$$x(\tau_k) = A_0 + 2 \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ A_m \cos\left(\frac{2\pi}{N}m\tau_k\right) + B_m \sin\left(\frac{2\pi}{N}m\tau_k\right) \right\} + A_n \cos\left(\frac{2\pi}{N}n\tau_k\right), \quad k = \overline{1, N}.$$

Зная амплитуды всех гармоник

$$S = [A_0 \quad 2A_1 \quad \dots \quad 2A_{n-1} \quad 2B_1 \quad \dots \quad 2B_{n-1} \quad A_n]^T,$$

найдем все x_t по формуле (6).

3.3. Построение виртуального анализатора

Поскольку массообменные технологические процессы нелинейны по своей природе, необходимо разработать адаптивные ВА, которые будут учитывать нелинейность технологического процесса и адаптироваться к текущему режиму ТП. В связи с этим для построения ВА использовались нелинейный метод проекций на латентные структуры (НПЛС) [11] и нейронная сеть прямого распространения (НСПР) [12].

НПЛС основан на преобразовании матрицы U ($N \times p$) и вектора Y ($N \times 1$) в небольшую ($p \times p$) квадратную матрицу “ядра” $U^T Y Y^T U$ размера, равного

количеству входных переменных. Используя матрицу “ядра” $U^T Y Y^T U$ вместе с матрицами $U^T U$ ($p \times p$), $U^T Y$ ($p \times 1$) и $Y Y^T$ (1×1), можно вычислить значения прогноза выхода (3) как

$$(7) \quad \hat{Y} = \mathbf{K}U(\mathbf{T}^T \mathbf{K}U)^{-1} \mathbf{T}^T Y,$$

где \mathbf{K} — матрица Грама с гауссовой функцией ядра, \mathbf{T} — вектор счета.

Архитектура НСПР представлена одним слоем входных нейронов, из которого сигналы поступают на один скрытый слой, размерность которого выбрана равной размерности входного слоя, и затем передаются на слой выходных нейронов.

3.4. Вычисление параметров прогнозирующего фильтра

В случае выявления статистически значимой сериальной корреляции в последовательности ошибок $\overline{e_1, e_N}$ применяемого ВА возможно уточнение предсказания выходной переменной. Такое уточнение достигается в результате поправки \hat{e}_t , отыскиваемой как прогноз ошибки модели e_t , вычисленный в момент $(t - 1)$ по известным к тому времени ошибкам $e_{t-1}, e_{t-2}, \dots, e_1$. Поправка \hat{e}_t может быть передана на выход прогнозирующей модели через контур обратной связи (рис. 3). На рис. 3 $B(u)$ — символическое обозначение оператора реального объекта, \hat{B} — оператор прогнозирующей модели, \hat{y}_t^* — скорректированный выход модели, q^{-1} — оператор сдвига на один шаг назад, $F(q^{-1})$ — передаточная функция прогнозирующего фильтра, \hat{e}_t — прогноз ошибки e_t .

Воспользуемся широким и гибким классом моделей авторегрессии — скользящего среднего [13] для отыскания поправки \hat{e}_t . В рамках этого подхода прогнозируемый процесс рассматривается как выход обратимого линейного фильтра (“формирующего фильтра”), на вход которого поступает “белый

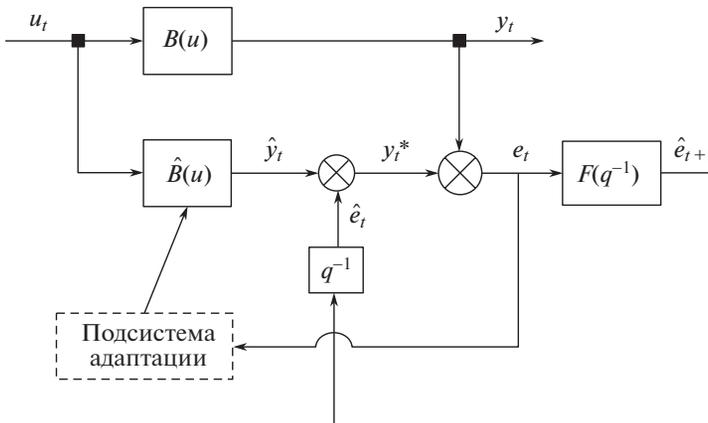


Рис. 3. Схема функционирования адаптивного ВА.

шум”, т.е. стационарный процесс с постоянной спектральной плотностью. Передаточная функция формирующего фильтра $P(q^{-1})$ отыскивается в классе рациональных алгебраических функций оператора сдвига назад:

$$e_t - \bar{e} = P(q^{-1}) \varepsilon_t = \frac{\prod_{l=1}^{N_n} (1 - H_l q^{-1})}{\prod_{k=1}^{N_d} (1 - G_k q^{-1})} \varepsilon_t,$$

где ε_t и e_t — соответственно вход и выход формирующего фильтра в момент t ; \bar{e} — средний уровень процесса e_t ; N_n — порядок оператора скользящего среднего; N_d — порядок оператора авторегрессии; H_l, G_k — константы (в общем случае комплексные); q^{-1} — оператор сдвига на один интервал квантования назад, т.е. $q^{-k} e_t = e_{t-k}$. Условия стационарности и обратимости процесса e_t (необходимые для практического применения формирующего фильтра) принимают вид $|G_k| < 1, k = \overline{1, N_d}; |H_l| < 1, l = \overline{1, N_n}$ соответственно [13]. Если $F(q^{-1})$ — передаточная функция прогнозирующего фильтра, то $F(q^{-1}) = q [1 - P^{-1}(q^{-1})]$, где $P^{-1}(q^{-1})$ — передаточная функция фильтра, обратного к формирующему (т.е. фильтра, преобразующего наблюдаемый процесс $e_t - \bar{e}$ в белый шум ε_t):

$$P^{-1}(q^{-1}) (e_t - \bar{e}) = \frac{\prod_{k=1}^{N_d} (1 - G_k q^{-1})}{\prod_{l=1}^{N_n} (1 - H_l q^{-1})} (e_t - \bar{e}) = \varepsilon_t.$$

В случае постоянных временных интервалов между измерениями выходной переменной передаточную функцию формирующего фильтра для процесса $(e_t - \bar{e})$ можно идентифицировать как $P(q^{-1}) = \frac{1}{1 - a q^{-1}}$, откуда следует: $\hat{e}_t - \bar{e} = a(e_{t-1} - \bar{e})$, т.е. $F(q^{-1}) = a$, где a — постоянный коэффициент, удовлетворяющий условию стационарности: $|a| < 1$.

3.5. Использование критерия Колмогорова для проверки адекватности модели упредителя

Для равноотстоящих по времени измерений выходной переменной чаще всего в качестве критерия для проверки точности прогноза используются характеристики разброса ошибки, например среднеквадратическая ошибка (СКО) [14]. Существенным недостатком такого критерия является то, что значение СКО прогноза может убывать вследствие уменьшения дисперсии выходной (прогнозируемой) переменной, вызванного, в свою очередь, уменьшением дисперсии входов. В таком случае можно не заметить момента, когда данные уже не будут соответствовать изменившимся свойствам технологического процесса. Если же, наоборот, дисперсия входных переменных со временем возрастает, это приведет к возрастанию дисперсии выходной величины,

следовательно, к увеличению СКО прогноза. В этом случае традиционные критерии сигнализируют об отсечении данных, которые могли бы содержать полезную информацию.

В связи с этим предлагается критерий адекватности модели, основанный на проверке статистической гипотезы о постоянстве спектральной плотности последовательности ошибок прогноза. С этой целью временной ряд, состоящий из ошибок прогноза, подвергается преобразованию Фурье. Затем формируется вариационный ряд из квадратов амплитуд членов полученного ряда Фурье, соответствующих гармоническим частотам, и при помощи критерия Колмогорова проверяется статистическая гипотеза о равномерности его распределения.

Спектр плотности случайных величин $\overline{e_1, e_N}$ можно представить при помощи периодограммы второго порядка:

$$I_k = (2\pi N)^{-1} \left| \sum_{t=1}^N \exp\left(-j \frac{2\pi}{N} kt\right) (e_t - \bar{e}) \right|^2, \quad k = \overline{1, N-1},$$

где

$$\bar{e} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i, \quad j - \text{мнимая единица.}$$

Если e_t , $t = \overline{1, N}$ — взаимно независимые случайные величины с дисперсией σ_e^2 , то величины $4\pi I_k / \sigma_e^2$, $k = \overline{1, s}$, где $s = (N-1)/2$ при нечетном N и $s = (N-2)/2$ при четном N , подчинены распределению хи-квадрат с двумя степенями свободы.

Мера отклонения эмпирической функции распределения F_s от теоретической F_χ определяется как

$$D_s = \sup_{-\infty < x < \infty} |F_s(x) - F_\chi(x)|,$$

где

$$F_s(x) = \begin{cases} 0, & x < 4\pi I_1^* / \sigma_e^2, \\ i/s, & 4\pi I_i^* / \sigma_e^2 \leq x < 4\pi I_{i+1}^* / \sigma_e^2, \\ 1, & x \geq 4\pi I_s^* / \sigma_e^2, \end{cases}$$

$F_\chi(x) = 1 - e^{-\frac{x}{2}}$, $i = \overline{1, s-1}$, I_i^* — i -й член вариационного ряда, т.е. последовательности, полученной упорядочением значений I_k по возрастанию: $I_1^* \leq I_2^* \leq \dots \leq I_s^*$.

Функция распределения случайной величины $\sqrt{s}D_s$ при больших s (при $s > 20$) близка к функции распределения Колмогорова [15, 16].

Этот критерий использовался в [17] для вычисления поправки ошибки, повышающей точность предсказания выходной переменной. В этой работе он

применяется как “мера близости” используемой прогнозирующей модели к модели, оптимальной в данной конкретной ситуации. Статистически значимое отклонение применяемой в данный момент модели от оптимальной, выявленное при помощи критерия Колмогорова, выполняет функцию сигнала о корректировке модели и прогнозирующего фильтра в процессе адаптации.

3.6. Накопление N_b измерений

По мере поступления новых измерений вычисляются ошибки прогнозов. Результаты измерений и ошибки прогнозов аккумулируются в буфере до его заполнения. После накопления N_b измерений проверяется адекватность модели, используемой для оценки выходной переменной МТО.

Вычисляется значение предлагаемого критерия адекватности. Если найденное значение попадает в область, вероятность попадания в которую равна $1 - \alpha$, то оснований для изменения модели нет. В противном случае используемая модель считается утратившей адекватность вследствие изменения статистических характеристик прогнозируемого (нестационарного) процесса.

В случае необходимости корректировки модели для адаптивного ВА “отсекаются” N_b “наиболее старых” (т.е. полученных раньше других) измерений, затем строится новая модель. Для построения новой модели используются результаты всех имеющихся на данный момент измерений за исключением “отсеченных”.

4. Построение адаптивного ВА с использованием предлагаемого подхода изменения интервала дискретизации на примере реакционно-ректификационного технологического процесса

Для построения ВА использовался набор данных $N_0 = 250$, накопление измерений осуществлялось в буфере размером $T_b = 50$ [13]. В качестве уровня значимости для предлагаемого критерия было выбрано значение $\alpha = 0,05$. Для проверки работы алгоритма использовался тестовый сегмент данных с 18/06/2020 г. по 31/10/2021 г.

Временные интервалы между близлежащими (по времени измерения) значениями выходной переменной Y различны, поэтому применяется предложенный алгоритм изменения шага дискретизации. Интервал шага дискретизации составил 12 ч.

Выход модели представлен в виде авторегрессии пятого порядка:

$$(8) \quad y_t = \sum_{k=1}^5 a_k y_{t-k} + \varepsilon_t.$$

Характеристическое уравнение упрединителя:

$$1 - \sum_{k=1}^5 a_k q^{-k} = 0.$$

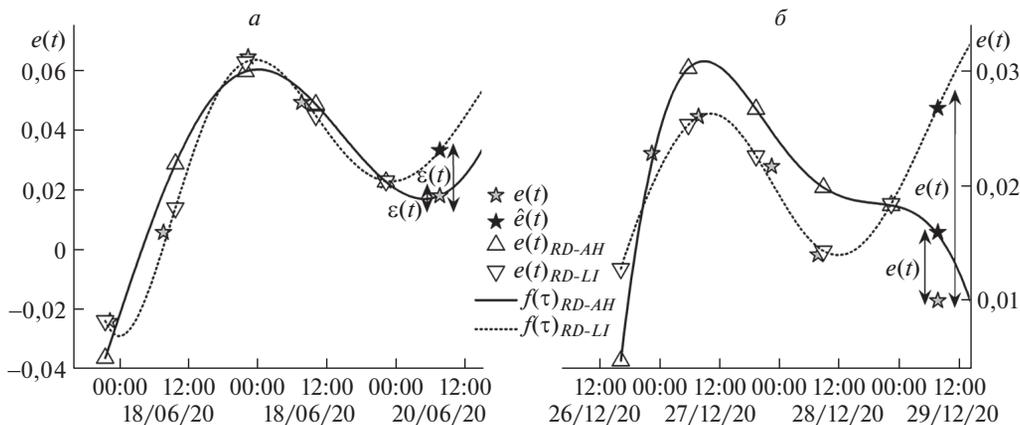


Рис. 4. Значения ошибок выходной переменной (2): *a* — на интервале с 18/06/2020 г. по 20/06/2020 г.; *б* — на интервале с 26/12/2020 г. по 29/12/2020 г.

Эвентуальная функция прогнозирующего фильтра пятого порядка описывается выражением

$$(9) \quad y(\tau) = \sum_{k=1}^5 C_k q_k^{(\tau-\tau_0)},$$

где $\tau_0 = t - 5$, $\tau = t - 1, \dots, t - 5$ [13].

На рис. 4 представлен прогноз $\hat{e}(t)$ на интервал времени τ , величина которого не кратна шагу квантования, с использованием эвентуальных прогнозирующих функций $f(\tau)_{RD-LI}$ и $f(\tau)_{RD-AH}$ вида (9), построенных на рассчитанных значениях ошибок (2) на основе данных, полученных с использованием линейной интерполяции $e(t)_{RD-LI}$, и на основе данных, полученных с использованием предложенного алгоритма изменения шага дискретизации $e(t)_{RD-AH}$ соответственно.

Следует отметить, что ошибка прогноза ошибок $\varepsilon(t)$ на интервалах времени τ получается меньше с использованием эвентуальной прогнозирующей функции, полученной на значениях $e(t)_{RD-AH}$, что дает существенное преимущество предложенного подхода к изменению интервала дискретизации в сравнении с линейной интерполяцией.

5. Апробация построения адаптивного ВА с использованием предлагаемого критерия на примере реакционно-ректификационного технологического процесса

В процессе прогнозирования концентрации МВБЭ в условии равноотстоящих по времени измерений выходной переменной в качестве оценки \bar{e} уровня последовательности e_t использовалось среднее арифметическое величин,

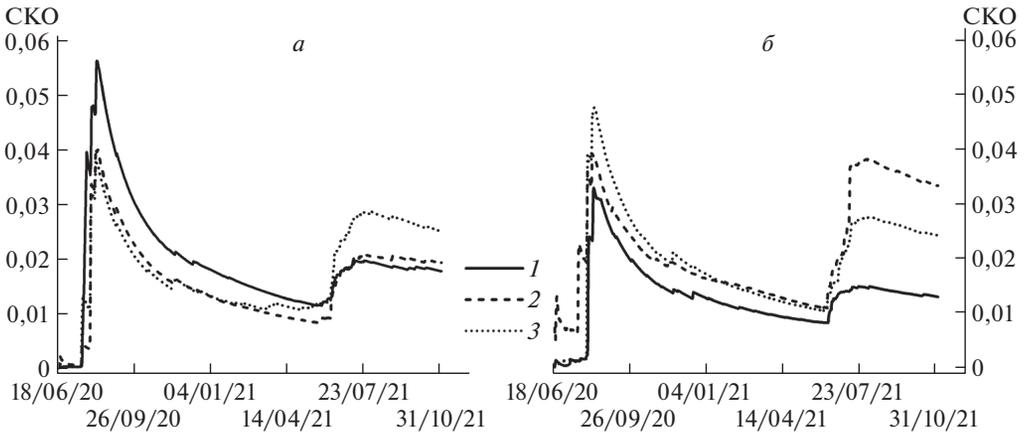


Рис. 5. Изменение СКО в ходе процесса на тестовом сегменте данных: *а* — функционирование адаптивного ВА, полученного с использованием НСПР; *б* — функционирование адаптивного ВА, полученного с использованием НПЛС.

входящих в предыдущий буфер, т.е. если e_t входит в M -й (в хронологической последовательности) буфер, то

$$\bar{e} = \bar{e}_{M-1} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=N_{M-1}+1}^{N_{M-1}+N_b} e_i,$$

где $N_{M-1} = N_0 + (M - 2) N_b$. Для ошибок прогнозирующей модели $\overline{e_1, e_{N_b}}$, входящих в первый буфер, оценкой уровня \bar{e} считалось среднее арифметическое первых N_0 значений.

Статистическая оценка коэффициентов $\overline{a_1, a_5}$, найденная методом наименьших квадратов по первым 250 измерениям, составила $\hat{a}_1 = 0,3007$, $\hat{a}_2 = -0,0902$, $\hat{a}_3 = -0,0195$, $\hat{a}_4 = 0,0072$, $\hat{a}_5 = 0,0094$, тогда как оценка среднего \bar{e} оказалась практически (с точностью до тринадцатой цифры после десятичной точки) равной нулю. Этого, конечно, следовало ожидать, так как первые N_0 измерений по сути составляют обучающую выборку. Последующие измерения вследствие нестационарности прогнозируемого процесса постепенно отклоняются от первоначальной оценки среднего. Поэтому оценка \bar{e} в процессе адаптации пересчитывалась как среднее значение величин e_t , входящих в последний из заполненных буферов. Через 480 ч после начала процедуры критерий адекватности используемой модели подал сигнал о необходимости коррекции. Итоговая вычисленная оценка коэффициентов прогнозирующего фильтра оказалась равна $\hat{a}_1 = 0,7301$, $\hat{a}_2 = -0,2201$, $\hat{a}_3 = 0,0541$, $\hat{a}_4 = 0,0363$, $\hat{a}_5 = 0,0071$.

На рис. 5 представлен сравнительный анализ вычислений СКО, полученных с применением предлагаемого критерия адаптации на основе критерия Колмогорова (линия 1), с предложенным в [18] критерием с использованием

Таблица 1. Результаты вычислений СКО на тестовом сегменте данных с адаптацией

Разработка ВА	Адаптация		
	на основе критерия Колмогорова	с использованием кластеризации	на основе “движущегося окна”
НПЛС	0,0129	0,0333	0,0242
	Улучшение, %	61,2	46,7
НСПР	0,0176	0,0192	0,0250
	Улучшение, %	8,1	29,4

кластеризации (линия 2) и с использованием подхода “движущегося окна” (линия 3). Сравнение проведено для разработанных ВА на основе НПЛС и НСПР на тестовом сегменте данных.

Среднее значение СКО (по всему временному интервалу прогнозирования с адаптацией) прогноза составило 0,0129 (для адаптивного ВА, полученного на основе НПЛС) при использовании критерия Колмогорова в качестве критерия адаптации (см. табл. 1).

6. Заключение

В условиях непостоянства временных интервалов между измерениями выходной переменной предложен алгоритм изменения шага квантования на основе вычисления амплитуд всех гармонических составляющих процесса. Такой подход позволил избежать искажения спектральной плотности процесса и повысить точность прогноза выходной переменной. Для равноотстоящих по времени измерений выходной переменной представлен критерий адаптации на основе критерия Колмогорова. Точность адаптивного виртуального анализатора была увеличена до 61% при использовании нелинейного метода проекций на латентные структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бахтадзе Н.Н.* Виртуальные анализаторы (идентификационный подход) // *АиТ.* 2004. № 11. С. 3–24.
Bakhtadze N.N. Virtual Analyzers: Identification Approach // *Autom. Remote Control.* 2004. V. 65. P. 1691–1709.
<https://doi.org/10.1023/B:AURC.0000047885.52816.c7>
2. *Лотоцкий В.А., Чадеев В.М., Максимов Е.А., Бахтадзе Н.Н.* Перспективы применения виртуальных анализаторов в системах управления производством // *Автоматизация в промышленности.* 2004. № 5. С. 23–29.
3. *Udugama I.A., Camps M.A., Taube M.A., Thawita C., Anantpinijwatna A., Mansouri S.S., Yu W.* Novel soft sensor for measuring and controlling product recovery in a high-purity, multicomponent, side-draw distillation column // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2019. V. 58. No. 43. P. 20026–20035. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b04594>

4. *Bo C.M., Li J., Sun C.Y., Wang Y.R.* The application of neural network soft sensor technology to an advanced control system of distillation operation // Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks. Portland, OR, USA, 2003. V. 2. P. 1054–1058. <https://doi.org/10.1109/IJCNN.2003.1223836>
5. *Vallejo M., de la Espriella C., Gymez-Santamaria J., Ramirez-Barrera A.F., Delgado-Trejos E.* Soft metrology based on machine learning: a review // Meas. Sci. Technol. 2019. V. 31. No. 3. Art. 032001. <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ab4b39>
6. *Kadlec P., Gabrys B., Grbic R.* Review of adaptation mechanisms for data-driven soft sensors // Comput. Chem. Eng. 2011. V. 35. P. 1–24. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.07.034>
7. *Curreri F., Patanè L., Xibilia M.G.* Soft Sensor Transferability: A Survey // Appl. Sci. 2021. V. 11. No. 16. Art. 7710. <https://doi.org/10.3390/app11167710>
8. *Ditzler G., Roveri M., Alippi C., Polikar R.* Learning in nonstationary environments: a survey // IEEE Comput. Intell. Mag. 2015. V. 10. No. 4. P. 12–25. <https://doi.org/10.1109/MCI.2015.2471196>
9. *Alakent B.* Soft sensor design using transductive moving window learner // Comput. Chem. Eng. 2020. V. 140. Art. 106941. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106941>
10. *Kaneko H., Funatsu K.* Adaptive soft sensor model using online support vector regression with time variable and discussion of appropriate hyperparameter settings and window size // Comput. Chem. Eng. 2013. V. 58. P. 288–297. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.07.016>
11. *Kaneko H.* Estimating the reliability of predictions in locally weighted partial least-squares modeling // J. Chemom. 2021. Art. e3364. <https://doi.org/10.1002/cem.3364>
12. *Lu J., Zhao N.* Application of neural network algorithm in propylene distillation // arXiv preprint arXiv:2104.01774. 2021.
13. *Box G.E.P., Jenkins G.M., Reinsel G.C., Ljung G.M.* Time series analysis: forecasting and control. Hoboken, N.J.: Wiley, 2016. 709 p.
14. *Qin S.* Statistical process monitoring: basics and beyond // J. Chemometrics. 2003. V. 17. No. 8–9. P. 480–502. <https://doi.org/10.1002/cem.800>
15. *Колмогоров А.Н.* Об эмпирическом определении закона распределения // Теория вероятностей и математическая статистика / Под ред. Ю.В. Прохорова. М.: Наука, 1986. С. 134–141.
16. *Marsaglia G., Tsang W.W., Wang J.* Evaluating Kolmogorov's Distribution // Journal of Statistical Software. 2003. Vol. 8. No. 18. P. 1–4.
17. *Климченко В.В., Самотылова С.А., Торгашов А.Ю.* Обратная связь в прогнозирующей модели реакционно-ректификационного технологического процесса // Известия РАН. ТИСУ. 2019. № 4. С. 144–155. <https://doi.org/10.1134/S0002338819040073>
Klimchenko V.V., Samotylova S.A., Torgashov A.Yu. Feedback in a Predictive Model of a Reactive Distillation Process // J. Comput. Syst. Sci. Int. 2019. V. 58. No. 4. P. 637–647. <https://doi.org/10.1134/S1064230719040075>
18. *Снегирев О.Ю., Торгашов А.Ю.* Адаптация структуры и параметров нелинейных виртуальных анализаторов на примере промышленного реакционно-ректификационного технологического процесса // Автоматизация в промышленности. 2021. № 3. С. 3–11. <https://doi.org/10.25728/avtprom.2021.03.01>

Snegirev O.Yu., Torgashov A.Yu. Adaptation of the Structure and Parameters of Nonlinear Soft Sensors by the Example of an Industrial Reactive Distillation Process // Autom. Remote Control. 2021. V. 82. No. 10. P. 1774–1786.
<https://doi.org/10.1134/S0005117921100143>

Статъа представена к публикации членом редколлегии Н.Н. Бахтадзе.

Поступила в редакцию 08.02.2022

После доработки 20.06.2022

Принята к публикации 28.07.2022

Интеллектуальные системы управления, анализ данных

© 2022 г. А.А. ЗУЕНКО, канд. техн. наук (zuenko@iimm.ru),
(Кольский научный центр РАН, Апатиты)

МЕТОД МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ ЗАМКНУТЫХ МНОЖЕСТВ ОБЩИХ ПРИЗНАКОВ ОБЪЕКТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГРАММИРОВАНИЯ В ОГРАНИЧЕНИЯХ¹

Для решения задач машинного обучения разработан метод выявления замкнутых множеств общих признаков объектов (паттернов) обучающей выборки. Оригинальность метода заключается в том, что он реализован в рамках концепции программирования в ограничениях и использует для внутреннего представления и обработки обучающей выборки новый вид табличных ограничений — сжатые таблицы D -типа. Сокращение перебора достигается за счет применения предложенного способа ветвления дерева поиска и использования отношений частичного порядка на множествах объектов (признаков) для отсека неперспективных ветвей. Метод обладает оценкой вычислительной сложности, которая для некоторых типов входных данных лучше оценок, полученных для исследованных прототипов.

Ключевые слова: машинное обучение, программирование в ограничениях, табличные ограничения, замкнутые паттерны, формальные понятия.

DOI: 10.31857/S000523102212011X, **EDN:** KTHRSW

1. Введение

В статье рассматриваются задачи выявления паттернов (*Pattern Discovery*), использующие объектно-признаковое представление данных [1, 2]. Методы выявления замкнутых множеств общих признаков объектов (паттернов) являются востребованными в рамках различных направлений машинного обучения, в частности при поиске ассоциативных правил [3], генерации ДСМ-гипотез [4], анализе формальных понятий (АФП) [5–7] и т.п. В основе подобных методов лежат идеи и подходы, направленные на снижение трудоемкости вычислений. В [8] предложен подход к выявлению часто совместно встречающихся признаков, где данная задача представлена как задача удовлетворения ограничений (ЗУО). Также для решения обозначенной проблемы развивается направление АФП, которое является прикладной

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-07-00708-а).

ветвью алгебраической теории решеток [5–7]. В [9] приведен обзор алгоритмов нахождения множества формальных понятий, их алгоритмическая сложность составляет $O(|G| |M| |L| \min(|G|, |M|))$, где $|G|$ — количество объектов, $|M|$ — количество признаков, $|L|$ — конечный размер решетки, оцениваемый как $2^{\min(|G|, |M|)}$.

В настоящей работе предлагается подход, основанный на представлении задачи выявления паттернов в рамках парадигмы программирования в ограничениях (*Constraint Programming*) в форме специализированных табличных ограничений — сжатых таблиц.

2. Выявление сходства объектов в задачах машинного обучения

Методы выявления паттернов (*Pattern Discovery*) применяются во множестве прикладных областей, включая анализ поведения покупателей, медицину, биоинформатику, интеллектуальный анализ данных из всемирной паутины и т.п. [2]. К задачам выявления паттернов относятся, например: извлечение частотных наборов признаков (*frequent itemsets mining* — *FIM*), ассоциативных правил (*association rule mining* — *ARM*), последовательных паттернов (*sequential patterns mining* — *SPM*) и т.п.

При использовании математического аппарата АФП [7] для решения обозначенного класса задач термину “Замкнутый паттерн” соответствует термин “Содержание формального понятия”, а термину “Покрытие замкнутого паттерна” — термин “Объем формального понятия”. Формальные понятия определяются с помощью соответствия Галуа и представляют собой пары множеств вида: (объем, содержание) [5, 6]. Контекстом в АФП называют тройку $K = (G, M, I)$, где G — множество объектов, M — множество признаков, а отношение $I \subseteq G \times M$ говорит о том, какие объекты какими признаками обладают. Для произвольных $A \subseteq G$ и $B \subseteq M$ определены операторы Галуа:

$$A' = \{m \in M \mid \forall g \in A (g I m)\}, \quad B' = \{g \in G \mid \forall m \in B (g I m)\}.$$

Двукратное применение оператора Галуа является оператором замыкания.

Множество объектов $A \subseteq G$, при условии, что $A'' = A$, называется замкнутым. Пара множеств (A, B) , при условии, что $A \subseteq G$, $B \subseteq M$, $A' = B$ и $B' = A$, называется формальным понятием контекста K . Для множества объектов A множество их общих признаков A' служит описанием сходства объектов из множества A , а замкнутое множество A'' является кластером сходных объектов (с множеством общих признаков A').

Задача, которая ставится в исследовании, заключается в разработке эффективных методов поиска замкнутых паттернов обучающей выборки, что можно свести к задаче создания методов эффективного порождения формальных понятий. Данная задача актуальна, ввиду того, что результаты ее решения можно использовать как составные части при построении многих процедур машинного обучения.

3. Табличные ограничения в рамках технологии программирования в ограничениях

Согласно [10] ЗУО (Constraint Satisfaction Problem) заключается в поиске решений для сети ограничений (Constraint Network). Сеть ограничений задается тремя компонентами: $\langle X, D, C \rangle$: X — множество переменных $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$, D — множество доменов переменных $\{D_1, D_2, \dots, D_n\}$, C — множество ограничений $\{C_1, C_2, \dots, C_m\}$, которые регламентируют допустимые сочетания значений переменных. Каждый домен D_i описывает множество допустимых значений $\{v_1, \dots, v_k\}$ для переменной X_i .

Ограничение C_j со схемой $S_j = \{X_{j_1}, X_{j_2}, \dots, X_{j_k}\} \subseteq X$ будем обозначать $C_j[S_j]$ и понимать под этим обозначением следующее:

$$C_j[S_j] = \{t : \chi_{C_j}(t) = 1\},$$

где: $t = \{(X_{j_1}, a_{j_1}), (X_{j_2}, a_{j_2}), \dots, (X_{j_k}, a_{j_k})\}$, причем, $a_{j_k} \in D_{j_k}$.

$\chi_{C_j}(t)$ — характеристическая функция ограничения $C_j[S_j]$, областью определения которой являются все возможные отображения из S_j в множество $\bigcup_{i=1}^n D_i$.

Схожая формализация отношений, где кортеж трактуется как отображение, а отношение — как конечное множество отображений, встречается в [11].

Многочленные отношения, заданные экстенционально, могут быть выражены более компактно, чем полным перечислением своих кортежей. В [12] приводится обзор видов табличных ограничений, к которым, в частности относятся, сжатые таблицы (*compressed-table*, *compact-table*), а также смарт-таблицы или умные таблицы (*smart-таблицы*) [12–16]. Там же предложено классифицировать табличные ограничения на ограничения C -типа и ограничения D -типа. В настоящей работе используется два вида табличных ограничений, где в качестве ячеек выступают не отдельные элементы, а множества. Первый вид — это сжатые таблицы C -типа. Под сжатой таблицей C -типа размерности $m \times n$ будем понимать следующее:

$$\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & \cdots & X_n \\ D_1 & D_2 & \cdots & D_n \\ \left[\begin{array}{cccc} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{m1} & K_{m2} & \cdots & K_{mn} \end{array} \right] \stackrel{def}{=} \left\{ \left\{ (X_1, a_1), \dots, (X_n, a_n) \right\} : \right.$$

$$\left. \left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) \wedge \left(\bigvee_{i=1}^m \bigwedge_{j=1}^n \chi_{K_{ij}}(a_j) \right) = 1 \right\}.$$

Здесь K_{ij} обозначает компоненту-множество, $\chi_{D_j}(a_j)$ и $\chi_{K_{ij}}(a_j)$ — характеристические функции множества D_j , $\chi_{K_{ij}}(a_j)$ и множества K_{ij} соответ-

ственно. Областью определения обеих характеристических функций является множество $\bigcup_{i=1}^n D_i$.

В верхних двух строках таблицы (заголовок таблицы) перечисляются имена переменных и соответствующие переменным домены. Заголовок может отсутствовать.

Другой вид используемых в работе табличных ограничений — это сжатые таблицы D -типа, которые записываются в обратных скобках:

$$\left[\begin{array}{cccc} X_1 & X_2 & \cdots & X_n \\ D_1 & D_2 & \cdots & D_n \\ K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{m1} & K_{m2} & \cdots & K_{mn} \end{array} \right] \stackrel{def}{=} \left\{ \left\{ (X_1, a_1), \dots, (X_n, a_n) \right\} : \left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) \wedge \left(\bigwedge_{i=1}^m \bigvee_{j=1}^n \chi_{K_{ij}}(a_j) \right) = 1 \right\}.$$

В [12, 16] описаны правила распространения табличных ограничений, которые могут быть использованы для дополнительного ускорения предлагаемого метода. К сжатым таблицам могут быть применены операции реляционной алгебры, также к ним применяется операция дополнения многоместных отношений, которая практически не используется в реляционных СУБД. Приведем теорему, из формулировки которой видна низкая вычислительная сложность операции дополнения для сжатых таблиц.

Теорема 1. Пусть дана сжатая таблица C -типа, содержащая m строк и n столбцов

$$T[X_1, X_2, \dots, X_n] = \left[\begin{array}{cccc} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{m1} & K_{m2} & \cdots & K_{mn} \end{array} \right],$$

тогда ее дополнение $\overline{T[X_1, X_2, \dots, X_n]}$ относительно универсума

$$U[X_1, X_2, \dots, X_n] = \left\{ \left\{ (X_1, a_1), \dots, (X_n, a_n) \right\} : \left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) = 1 \right\}$$

может быть представлено в виде сжатой таблицы D -типа той же размерности, где каждая компонента является дополнением соответствующей

щей компоненты исходной таблицы C -типа:

$$\overline{T[X_1, X_2, \dots, X_n]} = \begin{bmatrix} \overline{K_{11}} & \overline{K_{12}} & \cdots & \overline{K_{1n}} \\ \overline{K_{21}} & \overline{K_{22}} & \cdots & \overline{K_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{K_{m1}} & \overline{K_{m2}} & \cdots & \overline{K_{mn}} \end{bmatrix}.$$

Доказательство. Поскольку под $\overline{T[X_1, X_2, \dots, X_n]}$ понимается выражение: $\overline{T[X_1, X_2, \dots, X_n]} = U[X_1, X_2, \dots, X_n] \setminus T[X_1, X_2, \dots, X_n]$, то

$$\begin{aligned} \chi_{U \setminus T}(t) &= \left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) \wedge \neg \\ &\quad \neg \left[\left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) \wedge \left(\bigvee_{i=1}^m \bigwedge_{j=1}^n \chi_{K_{ij}}(a_j) \right) \right] = \\ &= \left(\bigwedge_{j=1}^n \chi_{D_j}(a_j) \right) \wedge \left(\bigwedge_{i=1}^m \bigvee_{j=1}^n \neg \chi_{K_{ij}}(a_j) \right). \end{aligned}$$

Полученная функция в точности описывает сжатую таблицу $\overline{T[X_1, X_2, \dots, X_n]}$, что и требовалось доказать.

4. Выявление замкнутых множеств общих признаков объектов с помощью методов программирования в ограничениях

Разработанный метод состоит из двух этапов: на первом этапе генерируются кандидаты в формальные понятия, на втором выполняется проверка, удовлетворяют ли кандидаты требованиям к формальным понятиям.

Особенности первого этапа

На первом этапе важно исключить как можно больше заведомо неперспективных вариантов. Для этого необходимо выполнить следующие шаги:

- 1) представить обучающую выборку в виде сжатой таблицы D -типа;
- 2) преобразовать полученную сжатую таблицу D -типа в эквивалентную ей сжатую таблицу C -типа, используя оригинальные способы ветвления и отсечения неперспективных ветвей дерева поиска.

В данном случае решение ЗУО состоит не в поиске элементарных кортежей, которые удовлетворяют сжатой таблице D -типа, сформированной на первом шаге, а в нахождении всех таких сжатых кортежей (*compressed tuples*) C -типа, которые описывают кандидатов в формальные понятия и представляют собой области в пространстве признаков X, Y .

В процессе решения каждому уровню дерева поиска сопоставляется одна из строк сжатой таблицы D -типа, а узлу — конкретная компонента данной

Таблица 1. Пример формального контекста

	m_1	m_2	m_3	m_4
g_1	0	0	1	1
g_2	0	1	1	0
g_3	1	0	0	1
g_4	1	1	1	0

строки. Каждое решение ЗУО формируется путем выбора по одной компоненте из каждой строки сжатой таблицы D -типа. В качестве примера для иллюстрации работы предлагаемого метода рассмотрим следующую объектно-признаковую таблицу (табл. 1).

Для данного примера выпишем следующую сжатую таблицу C -типа $\overline{K[XY]}$, где доменом атрибута X является множество G (множество объектов), а в качестве домена атрибута Y выступает множество M (множество признаков этих объектов):

$$\overline{K[XY]} = \begin{bmatrix} \{g_1, g_2\} & \{m_1\} \\ \{g_1, g_3\} & \{m_2\} \\ \{g_3\} & \{m_3\} \\ \{g_2, g_4\} & \{m_4\} \end{bmatrix}.$$

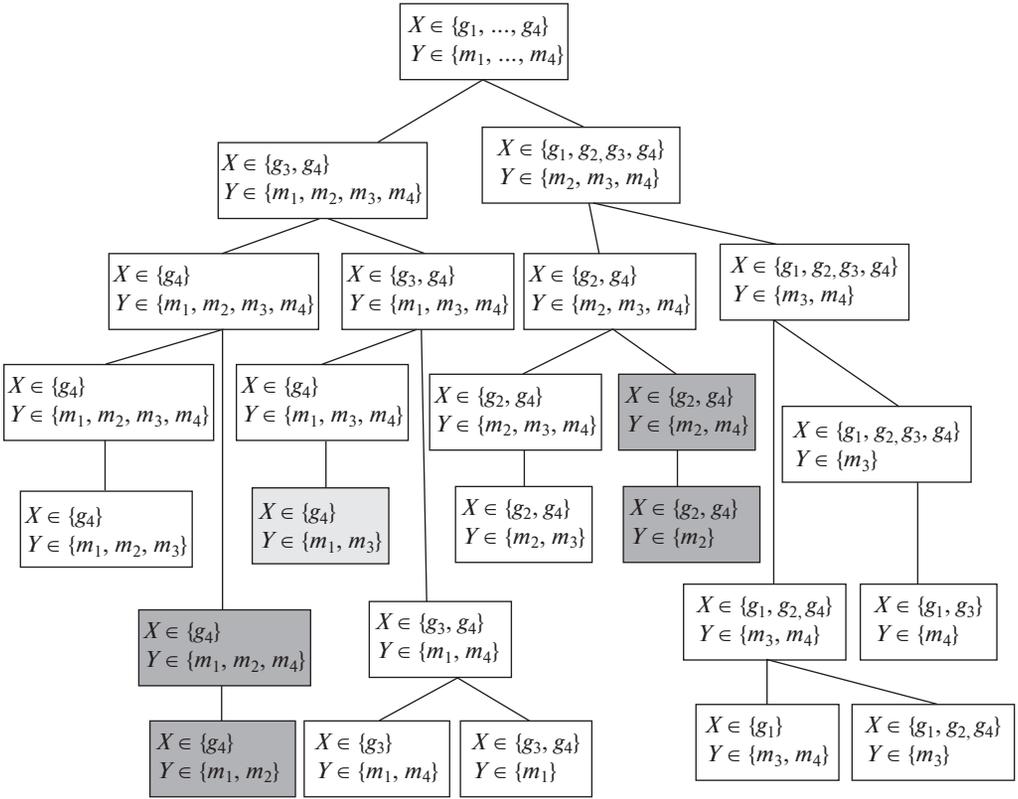
Каждая строка данной сжатой таблицы соответствует столбцу табл. 1 и описывает множество клеток, где не стоят “единички”.

Сжатая таблица целиком описывает дополнение отношения, представленного табл. 1.

Тогда, согласно теореме 1, дополнением отношения $\overline{K[XY]}$, которое соответствует самой табл. 1, будет следующая сжатая таблица $K[XY]$:

$$K[XY] = \begin{bmatrix} \{g_3, g_4\} & \{m_2, m_3, m_4\} \\ \{g_2, g_4\} & \{m_1, m_3, m_4\} \\ \{g_1, g_2, g_4\} & \{m_1, m_2, m_4\} \\ \{g_1, g_3\} & \{m_1, m_2, m_3\} \end{bmatrix}.$$

Сжатую таблицу D -типа $K[XY]$, описывающую формальный контекст, можно выписать по исходной табл. 1 без использования промежуточной сжатой таблицы C -типа, просматривая каждый столбец табл. 1 и сопоставляя ему соответствующий сжатый кортеж D -типа. Так, первый столбец табл. 1. (столбец m_1) соотносится с первым кортежем сжатой таблицы D -типа $K[XY]$. Компонента Y данного кортежа вычисляется следующим образом: $\{m_2, m_3, m_4\} = M \setminus \{m_1\}$. Компонента X представляет собой множество $\{g_3, g_4\}$, т.е. множество объектов, напротив которых стоят “единички” в столбце m_1 табл. 1. Вычислительная сложность преобразования объектно-признакового представления формального контекста в сжатую таблицу D -типа оценивается как $O(|G||M|)$.



Пример дерева поиска.

Исходную объектно-признаковую таблицу в виде сжатой таблицы D -типа можно записать и другим способом, сопоставляя кортежам сжатой таблицы не столбцы, а строки исходной объектно-признаковой таблицы. Второй способ предназначен для случая, когда число признаков превышает число объектов, первый способ подходит для случая, когда число объектов больше числа признаков. Поскольку в рассматриваемых задачах выявления паттернов, как правило, признаков существенно меньше, чем объектов, то дальнейшее описание метода (без потери общности) будет опираться на первый способ представления обучающей выборки. На рисунке приводится дерево поиска, которое получается в результате применения предложенного принципа ветвления.

Оценим в худшем случае сложность этапа генерации кандидатов в формальные понятия. Число операций, выполняемых для получения кандидатов, соответствует числу дуг в дереве поиска, которое определяется суммой членов геометрической прогрессии: $2 + 2^2 + \dots + 2^{\min(|G|, |M|)} = 2 * (2^{\min(|G|, |M|)} - 1)$. Выполнение каждой операции сводится к $|G| + |M|$ операциям умножения битов, поскольку информация вида $X \in A$, $Y \in B$ может быть представлена секционированным булевым вектором размера

$|G| + |M|$. Таким образом, число битовых операций логического умножения равно $2^*(|G| + |M|)^*(2^{\min(|G|, |M|)} - 1)$, а алгоритмическая сложность данного этапа оценивается как $O(2^*(|G| + |M|)^*2^{\min(|G|, |M|)})$.

Пусть формальный контекст записывается в виде сжатой таблицы $K[XY]$

$$\left[\begin{array}{cc} G_1 & M \setminus \{m_1\} \\ G_2 & M \setminus \{m_2\} \\ \dots & \dots \\ G_{|M|} & M \setminus \{m_{|M|}\} \end{array} \right] \stackrel{def}{=} \left\{ \left\{ (X, a_1), (Y, a_2) \right\} : \right. \\ \left. : (\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge \left(\bigwedge_{i=1}^{|M|} (\chi_{G_i}(a_1) \vee (\chi_{M \setminus \{m_i\}}(a_2))) \right) = 1 \right\}.$$

Тогда формальное понятие описывается сжатой таблицей C -типа $R[XY]$

$$[A, B] \stackrel{def}{=} \left\{ \left\{ (X, a_1), (Y, a_2) \right\} : (\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge (\chi_A(a_1) \wedge \chi_B(a_2)) = 1 \right\}.$$

При этом должны выполняться два условия:

- 1) $\forall t = \{(X, a_1), (Y, a_2)\} \quad \chi_{R[XY]}(t) \rightarrow \chi_{K[XY]}(t) = 1$;
- 2) не существует сжатой таблицы C -типа $Z[XY]$ такой, что

$$[S, V] \stackrel{def}{=} \left\{ \left\{ (X, a_1), (Y, a_2) \right\} : (\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge (\chi_S(a_1) \wedge \chi_V(a_2)) = 1 \right\}$$

и

$$\forall t \quad \chi_{Z[XY]}(t) \rightarrow \chi_{K[XY]}(t) = 1 \quad \text{и} \quad \forall t \quad \chi_{R[XY]}(t) \rightarrow \chi_{Z[XY]}(t) = 1.$$

Минимальные требования, предъявляемые к кандидату в формальные понятия, состоят в том, что он должен представлять собой сжатую таблицу C -типа $R[XY]$ того же вида, что и формальное понятие, и должно выполняться условие 1.

Теорема 2. Получаемое в результате применения предложенного метода множество кандидатов в формальные понятия содержит множество всех формальных понятий.

Доказательство теоремы вынесено в приложение.

Рассмотрим возможности ускорения предложенного метода. Во-первых, после выполнения операции выбора компоненты из некоторой строки можно осуществлять распространение ограничений на основе правил редукции для случая сжатых таблиц [12, 16]. Во-вторых, для отсека неперспективных ветвей дерева поиска можно использовать отношения частичного порядка на множествах объектов и признаков. В настоящей статье сосредоточим внимание на второй возможности.

Каждому объекту может быть сопоставлен булев вектор (строка в таблице “объект-признак”), каждому признаку — столбец в той же таблице. Так, объекту g_2 в табл. 1 соответствует булев вектор 0110, размерность которого совпадает с общим количеством признаков, а объекту g_4 соответствует вектор — 1110. В свою очередь, признак m_2 может быть представлен булевым вектором 0101, а например, признак m_3 — вектором 1101.

Будем говорить, что объект g_i (признак m_k) *доминирует* объект g_j (признак m_l) и обозначать $g_i \geq g_j$ ($m_k \geq m_l$) тогда и только тогда, когда булев вектор, соответствующий объекту g_i (признаку m_k), покомпонентно доминирует булев вектор, соответствующий объекту g_j (признаку m_l). Так, для данного примера: $g_4 \geq g_2$, $m_3 \geq m_2$.

При наличии у кандидата доминируемого признака (в примере — m_2) должен обязательно присутствовать и доминирующий признак (m_3), аналогично, если у кандидата множество объектов включает доминируемый объект (g_2), то оно должно включать и доминирующий объект (g_4). Иначе кандидат не является формальным понятием.

На рисунке вершины деревьев поиска, не удовлетворяющие данным требованиям, обозначены темно-серым цветом. Если какая-то вершина не удовлетворяет описанным требованиям, то никакие из ее дочерних вершин также не будут им удовлетворять.

Однако описанных проверок недостаточно, чтобы исключить всех неподходящих кандидатов. Так, на рисунке имеется листовая вершина, обозначенная светло-серым цветом, которая не соответствует определению формального понятия. Следовательно, необходим этап отсева кандидатов, не удовлетворяющих требованиям к формальным понятиям.

Особенности второго этапа

Для рассматриваемого примера все кандидаты в формальные понятия представлены на рисунке в виде листовых узлов дерева поиска. Для каждого листового узла, описываемого сжатым кортежем $[A, B]$, выполняются следующие действия: 1) для объектов A вычисляется A' , вычисление производится путем умножения булевых векторов, соответствующих объектам из множества A ; 2) A' сравнивается с множеством B , в случае несовпадения — выход с отрицательным результатом. Иначе проверка пройдена успешно.

Рассмотрим вершину дерева поиска, которая на рисунке затемнена светло-серым цветом: $[A = \{g_4\}, B = \{m_1, m_3\}]$. На первом шаге проверки получаем множество признаков A' , которое описывается булевым вектором 1110 (четвертая строка таблицы “объект-признак”), что соответствует множеству признаков $\{m_1, m_2, m_3\}$. На втором шаге сравнивается множество B , описываемое булевым вектором 1010, и множество A' . Рассматриваемый кандидат в формальное понятие не проходит проверку.

Сложность выполнения данного этапа зависит от количества проверяемых кандидатов — $2^{\min(|G|, |M|)}$. Проверка каждого из них в худшем случае сводится к выполнению $(|G| - 1)(|M|)$ операций битового умножения при первом

способе представления контекста в виде сжатой таблицы D -типа и к выполнению $((|M| - 1)(|G|))$ операций при втором способе представления. Операциями сравнения для оценки можно пренебречь. Таким образом, сложность этапа проверки: $O((|G| |M| - \min(|G|, |M|)) * 2^{\min(|G|, |M|)})$.

Общая алгоритмическая сложность двух этапов предлагаемого метода может быть оценена как: $O((|G| |M| + 2 * |M| + 2 * |G| - \min(|G|, |M|)) * 2^{\min(|G|, |M|)})$.

5. Заключение

Разработанный метод реализует новый подход к задаче эффективного порождения формальных понятий, в рамках которого данная задача ставится как задача удовлетворения табличных ограничений и используется оригинальное представление обучающей выборки с помощью сжатых таблиц D -типа. Искомыми решениями ЗУО ограничений являются не элементарные кортежи, а сжатые кортежи C -типа, которые соответствуют формальным понятиям. Получение требуемых сжатых кортежей C -типа обеспечивается за счет разработанного способа ветвления дерева поиска и выполняемых проверок. Предложенный метод обладает оценкой вычислительной сложности, которая для некоторых типов входных данных лучше оценок, упомянутых во введении.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Покажем, что каждый из $2^{|M|}$ генерируемых кандидатов в формальные понятия характеризуется уникальным множеством признаков Q , которое представляет собой один из элементов булеана множества признаков M , а множество объектов данного кандидата в формальные понятия равно множеству Q' (применение оператора Галуа к множеству Q), т.е. в данное множество объектов нельзя добавить никаких других объектов, имеющих тот же набор общих признаков Q . В этом случае множество генерируемых кандидатов в формальные понятия содержит множество всех формальных понятий.

Фактически предложенный метод сводится к раскрытию скобок в выражении для характеристической функции. Выполняя данное раскрытие, имеем

$$\chi_{K[XY]}(t) = \bigvee_{k=1}^{2^{|M|}} \left((\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge \bigwedge_{o \in I_k} \chi_{G_o}(a_1) \wedge \bigwedge_{r \in J_k} \chi_{M \setminus \{m_r\}}(a_2) \right),$$

где:

$$\begin{aligned} \forall k \in \{1, \dots, 2^{|M|}\} \quad I_k \cup J_k &= \{1, \dots, |M|\}, \quad I_k \cap J_k = \emptyset; \\ \forall l, e \in \{1, \dots, 2^{|M|}\} \quad I_l &\neq I_e, \quad J_l \neq J_e. \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\bigwedge_{r \in J_k} \chi_{M \setminus \{m_r\}}(a_2) = \chi_{\bigcap_{r \in J_k} M \setminus \{m_r\}}(a_2) = \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_k} \{m_r\}}(a_2),$$

тогда

$$\chi_{K[XY]}(t) = \bigvee_{k=1}^{2^{|M|}} \left((\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge \bigwedge_{o \in I_k} \chi_{G_o}(a_1) \wedge \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_k} \{m_r\}}(a_2) \right).$$

Каждое слагаемое этой логической суммы может быть взаимно однозначно сопоставлено с некоторым множеством признаков $M \setminus \bigcup_{r \in J_k} \{m_r\}$ — элементом булеана множества признаков. Слагаемое с фиксированным индексом k^* может быть сопоставлено сжатой таблице C -типа $R^{k^*}[XY]$, описывающей кандидата в формальные понятия

$$\left[\bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o, M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\} \right] = \left\{ \{(X, a_1), (Y, a_2)\} : (\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge \bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \wedge \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2) = 1 \right\}.$$

Очевидно, что $\forall t = \{(X, a_1), (Y, a_2)\} \quad \chi_{R^{k^*}[XY]}(t) \rightarrow \chi_{K[XY]}(t) = 1$.

Чтобы показать, что $\bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o$ является результатом применения оператора Галуа к $M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}$, докажем, что не существует сжатой таблицы C -типа $Z^{k^*}[XY]$ такой, что

$$\left[\bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o \cup W, M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\} \right], \quad W \subseteq \left(G \setminus \bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o \right), \quad W \neq \emptyset, \\ \chi_{Z^{k^*}[XY]}(t) \rightarrow \chi_{K[XY]}(t) = 1.$$

Распишем характеристическую функцию данной сжатой таблицы C -типа

$$\begin{aligned} & \chi_{Z^{k^*}[XY]}(t) = \\ & = (\chi_G(a_1) \wedge \chi_M(a_2)) \wedge \left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \vee \chi_W(a_1) \right) \wedge \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2). \end{aligned}$$

Поскольку в данном случае выполняется $G_0 \cup W \subseteq G$, $M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\} \subseteq M$, то $\chi_{Z^{k^*}[XY]}(t)$

$$\chi_{Z^{k^*}[XY]}(t) = \left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \vee \chi_W(a_1) \right) \wedge \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2).$$

Аналогично можно упростить и $\chi_{K[XY]}(t)$ (здесь рассматривается КНФ)

$$\chi_{K[XY]}(t) = \bigwedge_{i=1}^{|M|} (\chi_{G_i}(a_1) \vee (\chi_{M \setminus \{m_i\}}(a_2))).$$

Выражение $\forall t = \{(X, a_1), (Y, a_2)\} \quad \chi_{Z^{k^*}[XY]}(t) \rightarrow \chi_{K[XY]}(t) = 1$ выполняется, если верно

$$\forall i \in \{1, \dots, |M|\} \left(\left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \vee \chi_W(a_1) \right) \wedge \chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2) \right) \rightarrow \\ \rightarrow (\chi_{G_i}(a_1) \vee (\chi_{M \setminus \{m_i\}}(a_2))) = 1.$$

Другими словами, должно выполняться выражение

$$\forall i \in \{1, \dots, |M|\} \left(\left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \vee \chi_W(a_1) \right) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1) \right) \vee \\ \vee \left(\chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2) \rightarrow \chi_{M \setminus \{m_i\}}(a_2) \right) = 1.$$

Равенство $\left(\chi_{M \setminus \bigcup_{r \in J_{k^*}} \{m_r\}}(a_2) \rightarrow \chi_{M \setminus \{m_i\}}(a_2) \right) = 1$ верно при $i \in J_{k^*}$ и не верно при $i \in I_{k^*}$.

Рассмотрим выражение

$$\forall i \in I_{k^*} \left(\left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \vee \chi_W(a_1) \right) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1) \right) = 1.$$

Его можно преобразовать следующим образом:

$$\forall i \in I_{k^*} \left(\left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1) \right) \wedge (\chi_W(a_1) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1)) \right) = 1.$$

Заметим, что при любом $i \in I_{k^*}$ функция $\chi_{G_i}(a_1)$ совпадает с одной из функций $\chi_{G_o}(a_1)$ из произведения $\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1)$, поэтому при любом $i \in I_{k^*}$

$\left(\bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1) \right) = 1$. Покажем, что существует $i \in I_{k^*}$, при котором $(\chi_W(a_1) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1)) = 0$. В противном случае должно выполняться выражение $\left(\bigwedge_{i \in I_{k^*}} (\chi_W(a_1) \rightarrow \chi_{G_i}(a_1)) \right) = 1$, которое можно преобразовать так:

$\left(\chi_W(a_1) \rightarrow \bigwedge_{o \in I_{k^*}} \chi_{G_o}(a_1) \right) = 1$, а затем: $\left(\chi_W(a_1) \rightarrow \chi_{\bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o}(a_1) \right) = 1$. По-

следнее выражение не может быть выполнено, поскольку $W \subseteq \left(G \setminus \bigcap_{o \in I_{k^*}} G_o \right)$

и предполагается, что $W \neq \emptyset$. Таким образом, доказано, что не существует сжатой таблицы C -типа $Z^{k^*}[XY]$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bessiere C., De Raedt L., Kotthoff L. et. al.* Data Mining and Constraint Programming – Foundations of a Cross-Disciplinary Approach. Lecture Notes in Com. Science. 10101. Springer, 2016.
2. *Gan W., Lin J., Fournier-Viger P. et. al.* A survey of utility-oriented pattern mining // IEEE. Transactions on Knowledge and Data Engineering. 2021. V. 33. No. 4. P. 1306–1327.
3. *Boudane A., Jabbour S., Sais L. et. al.* Enumerating non-redundant association rules using satisfiability. Springer, 2017.
4. *Финн В.К., Аншаков О.М., Виноградов Д.В.* Многозначные логики и их применения. Том 2: Логики в системах искусственного интеллекта. М.: URSS, 2020.
5. *Ganter B., Wille R.* Formal Concept Analysis: Math. Foundations. Springer, 1999.
6. *Кузнецов С.О.* Автоматическое обучение на основе Анализа Формальных Понятий // АИТ. 2001. № 10. С. 3–27.
Kuznetsov S.O. Machine Learning on the Basis of Formal Concept Analysis // Autom. Remote Control. 2001. No. 62. P. 1543–1564.
7. *Wolff K.* Temporal Concept Analysis with SIENA // Supplementary Proceedings of ICFCA, Conference and Workshops. Frankfurt, Germany: Springer, 2019.
8. *Lazaar N., Lebbah Y., Loudni S. et. al.* A global constraint for closed frequent pattern mining. CP. Springer, 2016.
9. *Kuznetsov S.O., Obiedkov S.A.* Comparing performance of algorithms for generating concept lattices // J. Experiment. Theoret. Art. Int. 2002. V. 14. P. 189–216.
10. *Mackworth A.* Consistency in networks of relations // Art. Int. 1977. No. 8(1). P. 99–118.
11. *Maier D.* The Theory of Relational Databases. Computer Science Press, 1983.
12. *Zuenko A.* Representation and Processing of Qualitative Constraints Using a New Type of Smart Tables // 4th Int. Conference on Computer Science and Application Engineering (CSAE '20), 2020. 45. P. 1–7.
13. *Yap R., Wang W.* Generalized Arc Consistency Algorithms for Table Constraints: A Summary of Algorithmic Ideas // AAAI 2020. 2020. P. 13590–13597.
14. *Ingmar L., Schulte C.* Making Compact-Table Compact // CP 2018, Lecture Notes Comput. Sci. 2018. V. 11008. P. 210–218.
15. *Mairy J., Deville Y., Lecoutre C.* The Smart Table Constraint. Integration of AI and OR Techniques in Constraint Programming // CPAIOR 2015. Lecture Notes Comput. Sci. 2015. V. 9075. P. 271–287.
16. *Zuenko A.* Local Search in Solution of Constraint Satisfaction Problems Represented by Non-Numerical Matrices // 2nd Int. Conference on Computer Science and Application Engineering (CSAE '18), 2018. 138. P. 1–5.

Статья представлена к публикации членом редколлегии О.П. Кузнецовым.

Поступила в редакцию 26.01.2022

После доработки 02.06.2022

Принята к публикации 28.07.2022

СОДЕРЖАНИЕ

Тематический выпуск

Вступительное слово	3
Дюличева Ю.Ю. Выявление аффективных состояний на основе автоматического анализа текстов комментариев в социальных сетях	5
Ерохин В.И., Кадочников А.П., Сотников С.В. Достаточные условия значимости коэффициентов линейных моделей и полиномиальной сложности их определения по данным с интервальной неопределенностью ...	18
Скачков Н.А., Воронцов К.В. Улучшение качества машинного перевода с использованием обратной модели	31
Хрыльченко К.Я., Воронцов К.В. Оптимизация весов модальностей в тематических моделях транзакционных данных	44
Гришин В.А. Задача формирования покрытия области неопределенности эталонами для систем оптической навигации	63
Королев Н.С., Сенько О.В. Метод повышения эффективности обучения градиентного бустинга, основанный на модифицированных функциях потерь	78
Бериков В.Б. Модель и метод построения разнородного кластерного ансамбля	89
Анциперов В.Е. Генеративная модель автокодировщиков, самообучающихся на изображениях, представленных выборками отсчетов	108

Управление в технических системах

Климченко В.В., Снегирев О.Ю., Шевлягина С.А., Торгашов А.Ю. Разработка адаптивного виртуального анализатора с использованием прогнозирующего фильтра для нестационарного технологического процесса ...	141
--	-----

Интеллектуальные системы управления, анализ данных

Зуенко А.А. Метод машинного обучения для выявления замкнутых множеств общих признаков объектов с применением технологии программирования в ограничениях	156
--	-----

C O N T E N T S

Topical issue

Opening Remarks	3
Dyulichева Yu.Yu. Detection of Affective States based on Automatic Analysis of Comments from Social Networks V.I. Vernadsky Crimean Federal University ...	5
Erokhin V.I., Kadochnikov A.P., Sotnikov S.V. Sufficient Conditions to Significance of Coefficients of Linear Models and Polynomial Complexity of Their Determination from Data with Interval Uncertainty	18
Skachkov N.A., Vorontsov K.V. Improving Machine Translation Quality with Reverse Translation Models	31
Khrylchenko K.Ya., Vorontsov K.V. Optimizing Modality Weights in Topic Models of Transactional Data	44
Grishin V.A. The Problem of Uncertainty Region Coverage Generation by Reference Images for Optical Navigation Systems	63
Korolev N.S., Senko O.V. Method for Improving Generalization Performance of Gradient Boosting based on Modified Loss Functions.....	78
Berikov V.B. Model and Method for Constructing a Heterogeneous Cluster Ensemble.....	89
Antsiperov V.E. Generative Model for Autoencoders Learning on Images Given by Sampling Representations.....	108

Control in Technical Systems

Klimchenko V.V., Snegirev O.Yu., Shevlyagina S.A., Torgashov A.Yu. Development of Adaptive Soft Sensor based on Predictive Filter for Non-Stationary Mass-Transfer Process.....	141
--	-----

Intellectual Control Systems, Data Analysis

Zuenko A.A. The Machine Learning Method for Discovery of Closed Sets of Common Attributes of Objects Using Constraint Programming Technology.....	156
--	-----