

Wojciech CHOLEWA
Katedra Podstaw Konstrukcji Maszyn
Politechnika Śląska

WYBRANE KLASY MODELI DANYCH

Streszczenie. Opisano wybrane zagadnienia związane z modelowaniem danych liczbowych. Bezpośrednie zastosowanie sieci neuronalnych nie jest zadaniem trudnym. Niestety mogą one prowadzić do niepoprawnych lub niewystarczających wyników, zwłaszcza wtedy gdy należy rozpatrywać lokalną jakość modelu. Zaproponowano postępowanie polegające na stosowaniu modeli jednostronnych, które mogą być wyznaczone za pomocą programowania liniowego lub w wyniku wielostopniowego stosowania sieci neuronalnych.

SELECTED CLASSES OF DATA MODELS

Summary. The aim of this paper is to point out the selected problems connected with modelling of numerical data. Direct application of neural networks is quite easy. Of course they can produce incorrect or insufficient results, especially when the local quality of the model is important. General methodology suggested in the paper is to use unilateral models, that can be identified by means of linear programming as well as by means of multistage application of neural networks.

ИЗБРАННЫЕ КЛАССЫ МОДЕЛЕЙ ДАННЫХ

Резюме. Описано некоторые проблемы связанные с моделированием числовых данных. Непосредственное применение нейронных сетей это совсем нетрудная задача. К сожалению они могут вести к неправильным или недостаточным результатам, особенного тогда когда надо рассматривать местное качество моделей. Предложено подход основанный на применении односторонних моделей, которые надо определять с помощью линейного программирования или в результате многоступенного применения нейронных сетей.

1. WSTĘP

Liczne badania doświadczalne związane są z identyfikacją analitycznych modeli obiektów rzeczywistych. Często ogólna postać modelu jest znana i wynika np. z analizy działania badanego obiektu, a proces *identyfikacji modelu* sprowadza się do wyznaczenia wartości odpowiedniego zbioru parametrów. Odrębną klasę stanowią zadania, w których postać modelu nie jest znana. Dla, podkreślenia iż postać modelu nie jest znana, zadania te określa się jako *poszukiwanie modelu danych*. Zadania takie występują często podczas prób definiowania tablic decyzyjnych dla systemów doradczych [1].

Poszukując model danych, wyniki pomiarów (obserwacji) rozpatrujemy jako uporządkowane ciągi liczb - np. macierze kolumnowe:

$$\underline{y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T \quad (1)$$

Macierze (1) mogą być interpretowane jako współrzędne punktów przestrzeni wielowymiarowej. Kolejne współrzędne (osie) takiej przestrzeni odpowiadają kolejnym rozpatrywanym atrybutom (cechom) badanego obiektu. Wartości współrzędnych (liczby) są wartościami tych atrybutów. Dodatkową informacją uzyskiwaną z badań może być uporządkowanie tak otrzymanych punktów przestrzeni wielowymiarowej, gdzie szczególnym rodzajem zmiennej porządkującej jest czas. Prowadzi to do rozpatrywania macierzy (1) jako funkcji $\underline{y}(x)$ zmiennej porządkującej x :

$$\underline{y}(x) = [y_1(x), y_2(x), \dots, y_N(x)]^T \quad (2)$$

Dalsze uogólnienia mogą prowadzić do zastąpienia zmiennej porządkującej x odpowiednim elementem wielowymiarowym (macierzą) \underline{x} :

$$\underline{y}(\underline{x}) = [y_1(\underline{x}), y_2(\underline{x}), \dots, y_N(\underline{x})]^T \quad \text{gdzie } \underline{x} = [x_1, x_2, \dots, x_M]^T \quad (3)$$

Postać analityczna funkcji (3) nie jest znana. Wyniki badań określają tę funkcję jedynie w postaci zbioru par:

$$\underline{y}(\underline{x}) = \left\{ \langle \underline{x}_1, \underline{y}_1 \rangle, \langle \underline{x}_2, \underline{y}_2 \rangle, \dots, \langle \underline{x}_L, \underline{y}_L \rangle \right\} \quad (4)$$

Analityczna postać funkcji (3) może być poszukiwana (estymowana) w postaci odpowiedniego przybliżenia zbioru (4), zapisywanego jako funkcja:

$$\hat{\underline{y}}(\underline{x}) = [\hat{y}_1(\underline{x}), \hat{y}_2(\underline{x}), \dots, \hat{y}_N(\underline{x})]^T \quad (5)$$

Funkcja (5) jest modelem zbioru danych (4).

2. MODELE DANYCH

W celu wyznaczenia funkcji (5), jako modelu zbioru danych (4), konieczne jest przyjęcie odpowiedniego kryterium jakości przybliżenia. Powszechnie stosowane są kryteria minimalno-odległościowe, których podstawowymi przedstawicielami są:

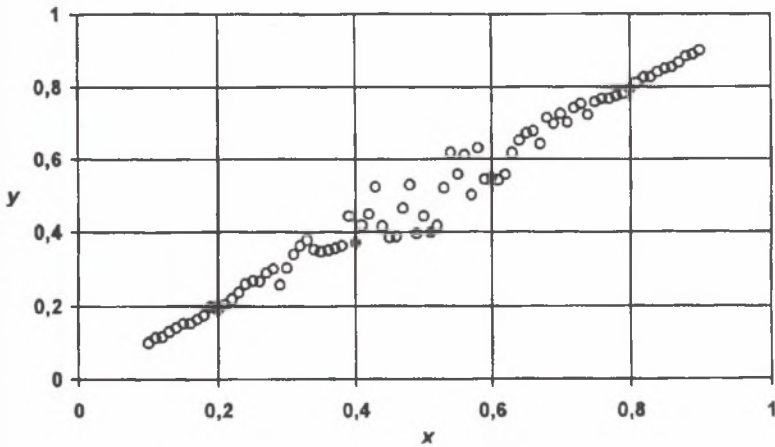
$$\sum_{i=1}^L \left(\| \underline{y}_i - \hat{\underline{y}}(\underline{x}_i) \| \right) \rightarrow \min$$

oraz:

$$\sum_{i=1}^L \left(\| \underline{y}_i - \hat{\underline{y}}(\underline{x}_i) \|^2 \right) \rightarrow \min \quad (7)$$

Zastosowanie kryterium minimalno-odległościowego prowadzi do modeli aproksymujących (przybliżających) dane. Duże znaczenie praktyczne, ze względu na prostą postać algorytmów związanych z jego stosowaniem, posiada tzw. *kryterium najmniejszych kwadratów* (7). Inną klasę kryteriów otrzymujemy po przyjęciu założenia, iż dla wszystkich (lub dla zadanej części) danych (4) zachodzić ma pełna zgodność wartości wyznaczonej funkcji z danymi uczącymi:

$$\forall_{i=1, \dots, L} \left[\underline{y}_i = \hat{\underline{y}}(\underline{x}_i) \right] \quad (8)$$



Rys. 1. Przykład zbioru danych uczących, zawierającego 81 elementów
Fig. 1. An example of training data with 81 elements

Kryterium (8) prowadzi do modeli interpolacyjnych. Rodzaj stosowanego kryterium zależy od postaci danych oraz od celu, w jakim wyznaczany jest model danych (5). Zalety i wady modeli aproksymacyjnych i interpolacyjnych omawiane są wyczerpująco w dostępnej literaturze. Niedogodnością wymienionych modeli jest brak prostych sposobów przekazywania informacji o dokładności modelu, zwłaszcza wtedy gdy dokładność ta zależy wyraźnie od wartości zmiennych niezależnych \underline{x} . Ogólnym sposobem określania lokalnych niedokładności modelu może być zastąpienie funkcji (5) parą funkcji

$$\langle \hat{\underline{y}}_-(\underline{x}), \hat{\underline{y}}_+(\underline{x}) \rangle \quad (9)$$

takich, że

$$P\left[\left(\hat{y}_-(x) \leq y(x)\right) \wedge \left(y(x) \leq \hat{y}_+(x)\right)\right] \geq \alpha \quad (10)$$

gdzie $P[\cdot]$ jest funkcją prawdopodobieństwa, a α oznacza wartość progową tej funkcji.

Funkcje (9) mogą być interpretowane jako szczególny rodzaj brzegów przedziału ufności, dla poszukiwanej nieznannej funkcji (5). Funkcje te są *jednostronnymi modelami danych* (modelami ograniczającymi te dane odpowiednio *od dołu* i *od góry*). Dla

$$\alpha = 1 \quad (11)$$

warunek (10) oznacza, że funkcje (9) wyznaczają przedział (w przestrzeni wielowymiarowej) zawierający wszystkie dane. Przyjmując (dla uproszczenia zadania), iż przedział wyznaczany przez funkcje (9) jest symetryczny względem funkcji (5), możemy wprowadzić symetryczne odchylenie wielowymiarowe $\Delta\hat{y}(x)$:

$$\Delta\hat{y}(x) = \hat{y}(x) - \hat{y}_-(x) = \hat{y}_+(x) - \hat{y}(x) \quad (12)$$

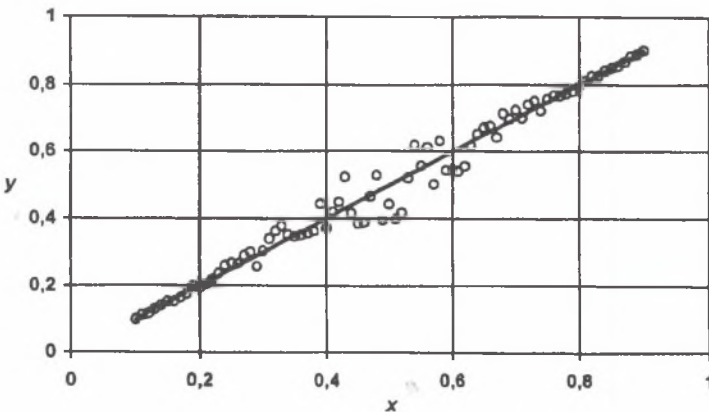
pozwalające na zapisywanie funkcji (9) w postaci:

$$\hat{y}_-(x) = \hat{y}(x) - \Delta\hat{y}(x) \quad \text{oraz} \quad \hat{y}_+(x) = \hat{y}(x) + \Delta\hat{y}(x) \quad (13)$$

Należy zwrócić uwagę na różnicę pomiędzy wprowadzonym symetrycznym odchyleniem wielowymiarowym (12) i stosowanym w statystyce odchyleniem standardowym polegającą między innymi na tym, że odchylenie standardowe rozpatrywane jest najczęściej jako wartość stała, niezależna od x .

2.1. Modele liniowe

Modele liniowe stanowią podstawową klasę modeli danych. Charakteryzują się one prostymi algorytmami ich wyznaczania. Nazwa klasy (*modele liniowe*) jest stosowana w różnym znaczeniu. W niniejszym opracowaniu przyjęto, że rozpatrywane są modele liniowe ze



Rys. 2. Liniowy model danych
Fig. 2. Linear model of training data

względem na współczynniki modelu, tzn. takie, w których funkcja (5) zapisywana jest jako suma:

$$\hat{y}_n(\underline{x}) = \sum_{k=1}^K [a_{n,k} \cdot g_k(\underline{x})] \quad (14)$$

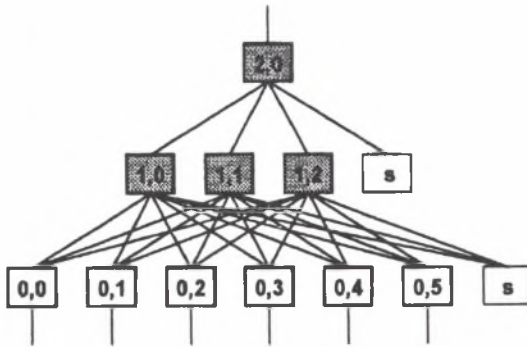
gdzie funkcje $g_k(\underline{x})$ są dowolnymi funkcjami zmiennej \underline{x} . Nie zakłada się, że są to funkcje liniowe. Na rys. 2 pokazano przykład modelu liniowego (14), wyznaczonego za pomocą programu MAS_DB [3] z zastosowaniem kryterium (7), dla jednowymiarowych danych uczących (rys. 1) po przyjęciu w (14)(7):

$$K = 2, \quad g_1(x) = 1; \quad g_2(x) = x \quad (15)$$

Identyfikacja modelu polega na wyznaczeniu dwóch parametrów $a_{1,1}$ oraz $a_{1,2}$ w (14). Oznacza to, że rozpatrywany model posiada dwa stopnie swobody. Z pokazanego przykładu (rys. 2) wynika, iż zastąpienie danych ich modelem liniowym prowadzi do utraty informacji o zmianach tych danych, w środkowej części rozpatrywanego przedziału zmiennej x (oczywiście wniosek ten dotyczy wyłącznie rozpatrywanego przykładu danych).

2.2. Modele nieliniowe

Z liczego zbioru nieliniowych modeli danych najczęściej stosowane są obecnie modele bazujące na koncepcji sieci neuronalnych. Przykład prostej sieci neuronalnej pokazano na rys. 3.



Rys. 3. Sieć neuronalna zawierająca warstwę węzłów wejściowych (6 węzłów), warstwę węzłów wyjściowych (1 węzeł) oraz jedną warstwę węzłów ukrytych (3 węzły)

Fig. 3. Neural network with the input layer (6 nodes), output layer (1 node) and hidden layer (3 nodes)

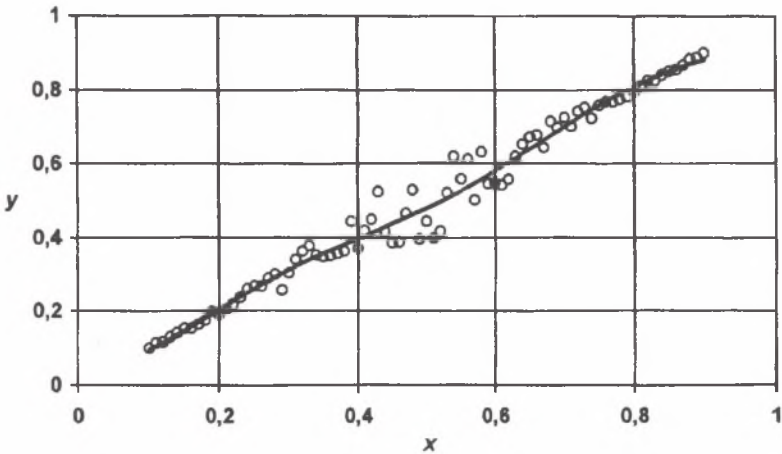
Sieci neuronalne składają się z warstw połączonych węzłów. Warstwa wejściowa zawiera wyłącznie węzły umowne, które przesyłają wartości ich wejść bezpośrednio na wyjścia (bez przekształcania). Każdy j -ty węzeł warstwy ukrytej lub wyjściowej l przekształca wyjścia $x_{l-1,j}$ węzłów warstwy poprzedzającej ($l-1$), w jego wyjście $x_{l,j}$

$$x_{l,j} = f(w_{l,j,n} + \sum_{i=0}^{n-1} w_{l,j,i} x_{l-1,i}) \quad (16)$$

gdzie $w_{l,j,i}$ są wagami i gdzie funkcją f aktywizującą węzły jest funkcja sigmoidalna

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (17)$$

Proces generowania sieci poprzedzany jest wyborem odpowiedniej struktury sieci, wyborem liczby warstw i liczby węzłów w kolejnych warstwach oraz wyborem strategii trenowania sieci. Proces trenowania sieci polega na iteracyjnym korygowaniu wartości wag, dla zadanych danych wejściowych, w celu uzyskania wartości wyjściowych optymalnych ze względu na kryterium podobne do kryterium (7), gdzie wartości wejściowe i wyjściowe odpowiadają danym uczącym. Po zakończeniu procesu trenowania sieci otrzymywany jest wynik w postaci zbioru wag opisujących węzły tej sieci.



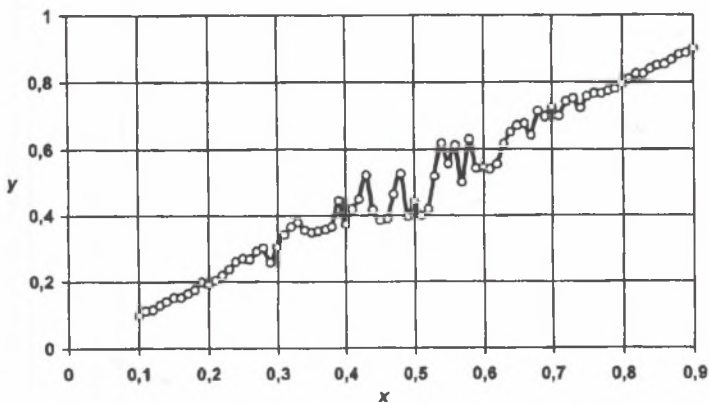
Rys. 4. Nieliniowy model danych otrzymany za pomocą trójwarstwowej sieci neuronalnej z liczbami węzłów 1, 3, 1 w kolejnych warstwach

Fig. 4. Non-linear model of training data given by 3-layer neural network with 1+3+1 nodes

Na rys.4 pokazano wykres nieliniowego modelu rozpatrywanych danych uczących, wyznaczonego za pomocą programu MAS_NN [2]. Identyfikacja modelu polega na wyznaczeniu $1*0+3*(1+1)+1*(3+1)=10$ parametrów w (16). Z przykładu (rys. 4) wynika, iż zastąpienie rozpatrywanych danych (rys. 1) ich modelem nieliniowym prowadzi (podobnie jak dla modelu liniowego) do utraty informacji o zmianach tych danych, w środkowej części rozpatrywanego przedziału zmiennej x .

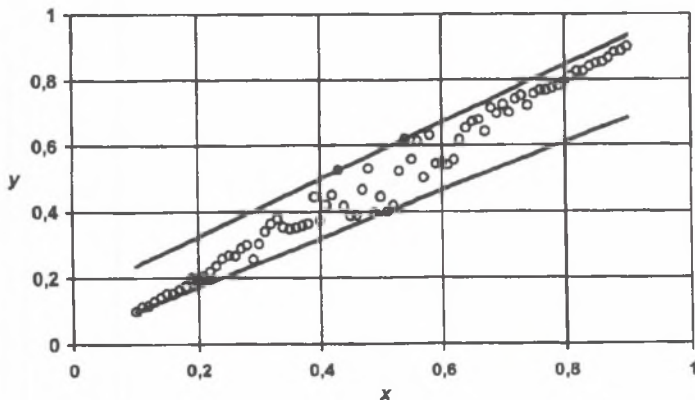
Ze stosowaniem sieci neuronalnych związany jest często popełniany błąd, polegający na przyjmowaniu bardzo rozbudowanej struktury sieci i jej trenowaniu na podstawie mało licznego zbioru danych uczących. Prowadzi to do sytuacji, gdzie liczba wyznaczanych parametrów może być większa od liczby danych. Oznacza to, że tak wyznaczany model nie stanowi uogólnienia danych, a jedynie jest zapisem tych danych w innej postaci. Przykładem

takiego błędnego postępowania może być próba identyfikacji, dla 81 danych pokazanych na rys. 1, modelu w postaci sieci neuronalnej zawierającej odpowiednio 1, 8, 8, 1 węzłów w kolejnych warstwach. Identyfikacja tego modelu wymaga wyznaczenia $1 \cdot 0 + 8 \cdot (1+1) + 8 \cdot (8+1) + 1 \cdot (8+1) = 97$ parametrów na podstawie 81 danych. O tym, czy otrzymany wynik (rys. 5) jest odpowiedni, rozstrzygać powinien cel prowadzonych badań. Niestety brak jest niezawodnych reguł, pozwalających na określenie optymalnego stopnia złożoności sieci neuronalnej. Wydaje się, że właściwą drogą postępowania jest trenowanie sieci na podstawie części danych, a następnie jej weryfikacja opierając się na pozostałych danych [4].



Rys. 5. Nieliniowy model danych, otrzymany za pomocą sieci neuronalnej posiadającej zbyt rozbudowaną strukturę

Fig. 5. Non-linear model of training data given by too complex neural network



Rys. 6. Para jednostronnych liniowych modeli danych

Fig. 6. Couple of unilateral linear models of training data

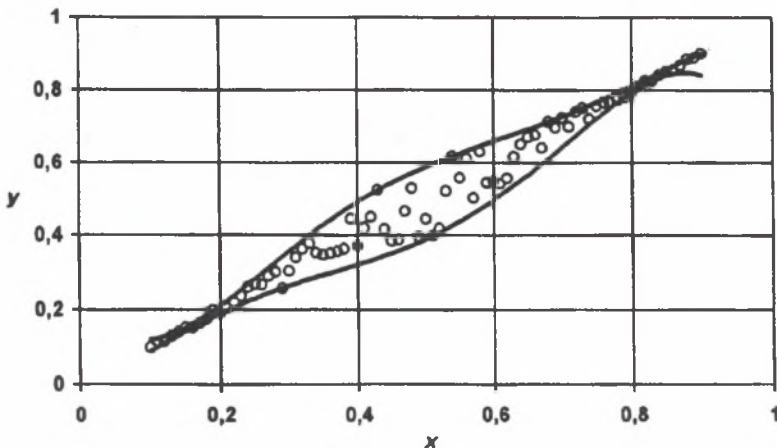
2.3. Modele jednostronne

Modele jednostronne spełniać mają warunek (10). Ponieważ warunek ten spełnia nieskończenie wiele funkcji (9), wprowadza się dodatkowe kryterium jakości modelu w postaci (6). Ponadto zakłada się, że poszukiwany model zapisywany będzie w postaci (14). W celu rozwiązania zadania należy zastosować odpowiedni algorytm programowania liniowego, np. opisywany w większości podręczników algorytm *sympleks* [5].

Na rys. 6 pokazano przykład modelu, wyznaczonego za pomocą programu MAS_DB [3], dla danych uczących (rys. 1) po uwzględnieniu (11) i przyjęciu (15) w (14). Z przykładu wynika, że obszary zawierające dane uczące szacowane są z dużym nadmiarem. Niedogodność tę można wyeliminować zwiększając rząd funkcji (14). Na rys. 7 pokazano przykład podobnie wyznaczanego modelu, dla:

$$K = 6; \quad g_1(x) = 1; \quad g_2(x) = x^1; \quad \dots; \quad g_6(x) = x^5 \quad (18)$$

Zaletą modeli jednostronnych, wyznaczanych z zachowaniem warunku (11), jest to, że obejmują one wszystkie dane uczące. Cecha ta może być jednak wadą, zwłaszcza wtedy gdy dane uczące zawierają elementy obciążone nadmiernymi odchyłkami. Dane takie (występujące najczęściej w niewielkiej liczbie) mogą decydować o małej dokładności wyznaczanego modelu. Dla uniknięcia tej niedogodności można stosować modele częściowo jednostronne.



Rys. 7. Para jednostronnych nieliniowych modeli danych

Fig. 7. Couple of unilateral non-linear models of training data

2.4. Modele częściowo jednostronne

Cechą charakterystyczną modeli częściowo jednostronnych jest to, że obejmują one jedynie część danych uczących. Modele takie można otrzymać w wyniku iteracyjnego wykonania następujących działań:

- wyznaczyć model jednostronny,
- pominąć zadaną liczbę danych zlokalizowanych najbliżej granicy wyznaczonego obszaru jednostronnego.

Algorytm ten gwarantuje otrzymanie wyniku, związany jest jednak z koniecznością wykonania dużej liczby działań. Innym skutecznym sposobem ich wyznaczania modeli jednostronnych jest modelowanie odchyłek (reszt) wcześniej wyznaczonego modelu nieliniowego. Jest postępowanie polegające na wykonaniu następujących działań:

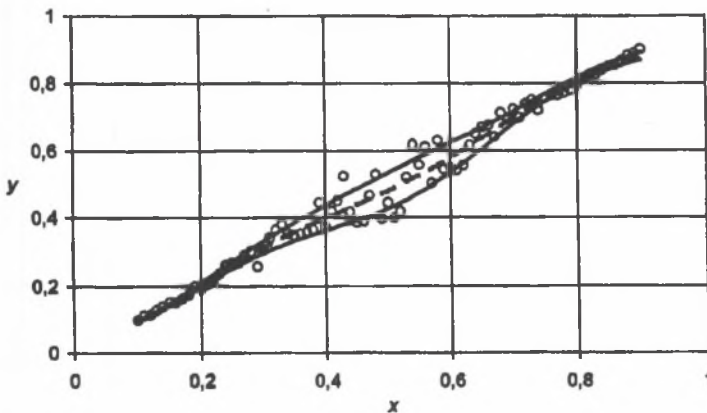
- wyznaczenie modelu (5) dla danych uczących, za pomocą sieci neuronalnej (jako modelu nieliniowego),
- modelowanie odchyłek, dla których przyjęto założenie (12):
 - wyznaczenie reszt $\delta(x)$ dla tak otrzymanego modelu:

$$\delta(x) = \hat{y}(x) - y(x) \quad (19)$$

- wyznaczenie bezwzględnych wartości reszt (19):

$$\Delta y(x) = [|\delta_1(x)|, |\delta_2(x)|, \dots, |\delta_N(x)|] \quad (20)$$

- wyznaczenie modelu (12) dla reszt (20) za pomocą sieci neuronalnej,
- zapisanie pary częściowo jednostronnych modeli w postaci (9) z uwzględnieniem (13).



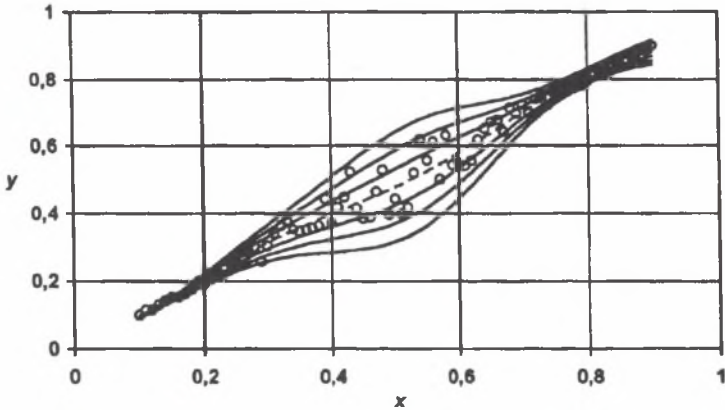
Rys. 8. Para częściowo jednostronnych nieliniowych modeli danych (gdzie linia przerywana jest wykresem nieliniowego modelu danych)

Fig. 8. Couple of partially unilateral non-linear models of training data (the dashed line represents non-linear model of the data)

Na rys. 8 pokazano przykład modelu otrzymanego za pomocą opisanego algorytmu, z zastosowaniem sieci neuronalnych posiadających odpowiednio 1, 3, 1 węzłów w kolejnych warstwach. Należy zauważyć, że część danych uczących występuje poza obszarem wyznaczonym przez parę modeli częściowo jednostronnych. Dla wyznaczenia progowej wartości prawdopodobieństwa α , występującej w (10), konieczne jest rozpoznanie charakteru rozkładu reszt (20). Zadanie to może być związane z dużymi trudnościami. W wielu zastosowaniach praktycznych dopuszczalna jest modyfikacja (13) do postaci:

$$\hat{y}_-(x) = \hat{y}(x) - \beta \cdot \Delta \hat{y}(x) \quad \text{oraz} \quad \hat{y}_+(x) = \hat{y}(x) + \beta \cdot \Delta \hat{y}(x) \quad \text{dla} \quad \beta > 0 \quad (21)$$

gdzie β jest parametrem określającym względną szerokość wyznaczanego symetrycznego obszaru. Na rys. 9 pokazano przykład rodziny par modeli częściowo jednostronnych, wyznaczonych wg. (21) dla parametru β równego 1, 2 i 3.



Rys. 9. Rodzina trzech par częściowo jednostronnych nieliniowych modeli danych
Fig. 9. Family of couples of partially unilateral non-linear models of training data

3. WNIOSKI

Sieci neuronale są uniwersalnym narzędziem, pozwalającym na wyznaczanie modeli danych. Opisany algorytm wyznaczania modeli częściowo jednostronnych pozwala (w wyniku wielokrotnego zastosowania sieci neuronalnych) na uzyskanie modeli zawierających informacje o dokładności wyznaczanego opisu rozpatrywanych danych.

LITERATURA

- [1] Cholewa W.: *Szkieletowy System Doradczy MAS. Dokumentacja użytkownika*. KPKM Gliwice 1993 (maszynopis - Dokumentacja systemu MAS, Tom I).
- [2] Cholewa W.: *Generator Sieci Neuronalnych MAS NN. Dokumentacja użytkownika*. KPKM Gliwice, 1993 (maszynopis - Dokumentacja Systemu MAS, Tom II).
- [3] Cholewa W.: *Generator Modeli Danych MAS_DB. Dokumentacja użytkownika*. KPKM Gliwice 1994 (maszynopis - Dokumentacja systemu MAS, Tom V).
- [4] Cholewa W., Kaźmierczak J.: *Diagnostyka techniczna maszyn. Przetwarzanie cech sygnałów*. Skrypt 1693. Politechnika Śląska, Gliwice 1992.
- [5] Stark R.M., Nicholls R.L.: *Matematyczne podstawy projektowania inżynierskiego*. PWN, Warszawa 1979.

Recenzent: prof. dr hab. inż. W. Gutkowski

Wpłynęło do Redakcji w grudniu 1994 r.