

УДК 681:51

Л.М. Любчик, В.А. Колбасин

Национальный технический университет «ХПИ», Харьков

РЕКУРРЕНТНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ МАТРИЦЫ ГРАММА ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ НЕЛИНЕЙНЫХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Рассмотрена задача рекуррентной идентификации нелинейной нестационарной динамической системы на основе ядерных методов в реальном масштабе времени. На основе метода скользящего контроля предложен алгоритм 2-го уровня для оценки параметра регуляризации. Предложен способ вычисления критерия качества для алгоритма второго уровня.

Ключевые слова: ядерные методы, матрица Грамма, регуляризация, скользящий контроль, рекуррентные алгоритмы.

Введение

Проблема идентификации нелинейных динамических систем по экспериментальным данным является в настоящее время предметом интенсивных исследований. Несмотря на обилие публикаций [11 – 13] она сохраняет свою актуальность, в первую очередь, за счет привлечения новых математических методов и расширения решаемых классов задач. Сохраняющиеся трудности в значительной мере связаны с проблемами структурной идентификации (с поиском структуры моделей), оптимальным образом согласованной с имеющейся априорной и текущей информацией [14 – 15]. Для нелинейных систем, характеризующихся сложным характером зависимостей между переменными, использование традиционного параметрического подхода приводит к существенным трудностям, связанным с вычислительными трудностями оценивания большого числа неизвестных параметров. Это, в свою очередь, стимулирует развитие непараметрических методов идентификации и методов «мягкой» идентификации на основе подходов вычислительного интеллекта. Эффективные подходы созданы на основе метода опорных векторов [15] и так называемых ядерных методов [7], обеспечивающих получение нелинейных версий алгоритмов идентификации, пригодных для использования в условиях малых выборок.

Ядерные методы, основанные на идее нелинейного преобразования исходных данных в новое пространство высокой размерности (пространство признаков), обеспечивают возможность идентификации нелинейных моделей высокой сложности. В соответствии с теоремой Мерсера, указанное преобразование выбирается таким образом, чтобы скалярные произведения в пространстве признаков имели вид положительно определенной функции-ядра. При этом идентифицируемая модель может быть представлена в непараметрической форме в виде взвешенной линейной комбинации функций-ядер, а соответствующие весовые коэффициенты могут быть вычислены без непосредственного использования векторов при-

знаков, что приводит к возможности получения весьма экономных и эффективных вычислительных процедур идентификации нелинейных систем [7 – 16].

Классические алгоритмы ядерной идентификации использовали для оценок полную выборку наблюдений и характеризовались ростом размерности модели с увеличением её длины. В настоящее время ведутся интенсивные поиски рекуррентных модификаций ядерных алгоритмов, пригодных для реализации в реальном масштабе времени и обеспечивающих ограничение сложности идентифицируемой модели [12]. В частности, разработаны ядерные аналоги рекуррентного метода наименьших квадратов [17] и метода скользящего среднего [11].

В настоящей работе рассматривается рекуррентный алгоритм ядерной идентификации со скользящим окном наблюдений. Также разработан алгоритм 2-го уровня, который позволяет оценивать параметр регуляризации в процессе рекуррентной идентификации нелинейной динамической системы.

Постановка задачи

Рассмотрим временной ряд $\{\eta_i\}_1^N$ – результат наблюдений переменной состояния некоторой сложной нелинейной динамической системы. Используя теорему Такенса [1, 2], будем предполагать, что для данной системы возможно построение модели в виде:

$$\eta_{k+1} = f(\eta_k, \eta_{k-1}, \dots, \eta_{k-m}) + \varepsilon_k, \quad k = 0, \dots, N,$$

где $f(\cdot)$ – эволюционный оператор (некоторая нелинейная функция); ε_k – белый шум, $E\{\varepsilon_k\} = 0$,

$E\{\varepsilon_k^2\} = \sigma^2$; величина m , называемая также размерностью вложения, неизвестна. Данное предположение является достаточно «мягким», т.к. к динамической системе предъявляется только требование гладкости функций в правых частях уравнений, описывающих систему. Таким образом, исходная задача может быть приведена к задаче структурной и параметрической идентификации модели вида

$$y_k = f(x_k) + \varepsilon_k, \quad k = 0, \dots, N$$

по наблюдаемой выборке $\{x_k, y_k\}_1^N$, где

$$x_k = (\eta_k, \dots, \eta_{k-m}) \text{ и } y_k = \eta_{k+1}.$$

Рассмотрим задачу, когда наблюдения поступают в реальном масштабе времени, т.е. в каждый момент времени k необходимо построить модель эволюционного оператора $f(\cdot)$.

Задача осложняется тем, что свойства системы со временем могут меняться: это может быть обусловлено либо изменением параметров, либо изменением структуры динамической системы.

Таким образом, необходимо построить рекуррентный алгоритм идентификации динамической системы по наблюдаемому временному ряду.

Оценка размерности вложения

До решения задачи идентификации системы необходимо оценить ее размерность вложения m . Для этого разработаны некоторые оценки: метод ложных соседей [3], корреляционная размерность [4], метод главных компонент [5]. Однако обычно приходится перебирать разные значения размерности, начиная с малых и постепенно их увеличивая, пока не будет достигнута удовлетворительная точность модели. Поэтому подбор размерности вложения может становиться частью единого целого процесса моделирования, а не отдельной законченной первой стадией [6].

Идентификация системы

В последнее время было разработано и предложено множество методов идентификации сложных динамических систем. Однако отсутствие априорной информации о системе вынуждает использовать методы, основанные на универсальных аппроксиматорах, к которым относятся искусственные нейронные сети, ядерные методы и другие.

Основным недостатком нейронных сетей является медленная сходимость, что создает проблемы при идентификации в реальном масштабе времени.

Далее будем рассматривать методы, основанные на ядерных аппроксимациях. В этом случае неизвестная функция $f(\cdot)$ представляется в виде:

$$\hat{f}(x; \alpha) = \sum_{i=1}^r \alpha_i \kappa(x, x_i), \text{ где } \alpha - \text{вектор весов; } \kappa(\cdot, \cdot) -$$

ядерная функция; r – количество опорных векторов.

Наиболее часто в качестве ядерной функции выбирается гауссово ядро:

$$\kappa(x_1, x_2) = \exp(-\mu \|x_1 - x_2\|_2^2), \text{ где } \mu - \text{настроечный}$$

параметр. Это обусловлено хорошими свойствами данного ядра, например гладкостью [7].

Таким образом, для построения модели необходимо оценить параметры α, λ, μ функции $\hat{f}(\cdot)$.

Параметры α определяются методом минимизации эмпирического риска, что приводит к оценке:

$$\alpha = K^{-1}Y, \tag{1}$$

где $K \in R^{N \times N}$ – матрица Грамма, построенная на g опорных векторах, $Y = (y_1, \dots, y_N)^T$.

Однако на практике зачастую матрица K плохо обусловлена, что приводит к неустойчивости решения, переобучению и плохой интерпретируемости результатов. Поэтому обычно применяется регуляризованная версия данного алгоритма:

$$\alpha = K(\lambda)^{-1}Y = (K + \lambda I)^{-1}Y, \tag{2}$$

где λ – параметр регуляризации, I – единичная матрица.

Для оценки настроечных параметров λ, μ на практике обычно используются различные вариации алгоритмов перебора. Однако наиболее мощным подходом для поиска параметров оказался подход, основанный на 2-х уровневой оптимизации (уровень 1: поиск α ; уровень 2: поиск λ, μ) [8]. На каждом уровне используется своя целевая функция: 1й уровень – функция эмпирического риска; 2й уровень – функция скользящего контроля (cross-validation). Т.е. алгоритм 1го уровня используется на 2м уровне как составляющая часть, которая возвращает функцию $f(x; \lambda, \mu)$.

Алгоритм рекуррентного оценивания

Т.к. свойства системы со временем могут меняться, то целесообразно использовать алгоритм, который будет «забывать» старые измерения и использовать только g последних измерений. Это позволит алгоритму подстраиваться под изменения реальной системы, а также ограничит вычислительную сложность алгоритма и сложность модели.

Рекуррентная оценка для такого алгоритма может быть получена с использованием последовательных преобразований регуляризованной матрицы Грамма:

$$K_{n-1, r}^{-1}(\lambda) \rightarrow K_{n-1, r-1}^{-1}(\lambda) \rightarrow K_{n, r}^{-1}(\lambda) \tag{3}$$

где первый индекс – момент времени, для которого рассчитывается матрица Грамма; второй индекс – размерность матрицы Грамма, т.е. количество измерений используемых для оценки вектора параметров α .

Тогда рекуррентный алгоритм примет вид:

$$\alpha_{n+1} = (\lambda^{-1}I_r + K_{n, r})^{-1}(\lambda^{-1}\alpha_n + Y_n)$$

$$K_{n-1, r-1}^{-1} = R_r K_{n-1, r}^{-1} R_r^T - (e_1^T K_{n-1, r}^{-1} e_1)^{-1} R_r K_{n-1, r}^{-1} e_1 e_1^T K_{n-1, r}^{-1} R_r^T;$$

$$K_{n, r}^{-1}(\lambda) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & \delta_n^{-1} \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$A = K_{n-1, r-1}^{-1} + \delta_n^{-1} \cdot K_{n-1, r-1}^{-1}$$

$$\cdot k_{n-1, r-1}(x_n) \cdot k_{n-1, r-1}^T(x_n) \cdot K_{n-1, r-1}^{-1}$$

$$B = -\delta_n^{-1} K_{n-1, r-1}^{-1} \cdot k_{n-1, r-1}(x_n);$$

$$C = -\delta_n^{-1} k_{n-1, r-1}^T(x_n) \cdot K_{n-1, r-1}^{-1};$$

$\delta_n = \lambda^{-1} + k_{n,n} - k_{n-1, r-1}^T(x_n) \cdot K_{n-1, r-1}^{-1} \cdot k_{n-1, r-1}(x_n)$,
 где I_n – единичная матрица $n \times n$, $R_r = (0_r : I_{r-1})$,
 $e_1 = (1 \ 0 \ \dots \ 0)^T$, $\kappa(x, x')$ – выбранная ядерная
 функция, $k_{n-1, r-1}^T(x_n) = (\kappa(x_n, x_{n-r+1}) \dots \kappa(x_n, x_{n-1}))$,
 $k_{n,n} = \kappa(x_n, x_n)$ [9].

К недостаткам приведенного алгоритма следует отнести следующий момент: в процессе подстройки модели к изменениям системы может возникнуть необходимость в подстройке параметров регуляризации λ и параметров ядра μ . Как видно из соотношения (4), для каждого следующего шага $n+1$ рекуррентно рассчитывается матрица $K_{n+1, r}^{-1}(\lambda)$, используя аналогичную матрицу, рассчитанную на предыдущем шаге. При этом в процессе рекуррентного пересчета в матрице $K_{n, r}^{-1}(\lambda)$ будет затруднительно изменить параметр регуляризации λ и параметры ядра μ . Это может потребоваться в нескольких случаях: изменение режима функционирования системы и увеличение плохой обусловленности матрицы $K_{n, r}(\lambda)$ вследствие сильно-зависимых данных. Огранич наше рассмотрение только анализом параметра λ .

Далее будем предполагать, что параметр ядра будет рассчитан либо методом линейного поиска, либо с помощью критерия скользящего контроля на начальном этапе работы алгоритма.

Чтобы преодолеть указанный недостаток, касающийся параметра регуляризации, можно воспользоваться сингулярным разложением матрицы $K(\lambda) = K + \lambda I = Q(\Lambda + \lambda I)Q^T$ и, следовательно:

$$K^{-1}(\lambda) = (K + \lambda I)^{-1} = Q(\Lambda + \lambda I)^{-1} Q^T. \quad (5)$$

Т.к. матрица $(\Lambda + \lambda I)$ диагональная, то и обратная матрица также диагональная, что приводит к соотношению: $\left((\Lambda + \lambda I)^{-1} \right)_{ii} = \frac{1}{\Lambda_{ii} + \lambda}$.

Таким образом, видно, что коэффициент регуляризации выступает в качестве стабилизирующего коэффициента: без регуляризации (когда $\lambda = 0$) маленькие собственные числа Λ_{ii} матрицы $K(\lambda)$ приводят к огромным собственным числам обратной матрицы $K^{-1}(\lambda)$. Увеличение коэффициента λ приводит к стабилизации получаемого решения.

Также можно получить интервал, в котором имеет смысл варьировать значение λ . Обычно это интервал $[\Lambda_{\min}; \Lambda_{\max}]$, т.к. слишком маленькие зна-

чения λ не стабилизируют систему, а слишком большие приведут к недообучению (underfitting).

Алгоритм 2-го уровня

Как было сказано ранее, для обоснованной оценки настроечных параметров необходимо использовать критерий 2-го уровня, например алгоритм скользящего контроля. Обычно используется 1-кратный скользящий контроль (leave-one-out cross-validation), когда вся обучающая выборка длиной N разбивается N различными способами на две непесекающиеся подвыборки:

- обучающая подвыборка длиной $N-1$
$$S^i =$$

$$= \{ (x_1, y_1), \dots, (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i+1}, y_{i+1}), \dots, (x_N, y_N) \};$$
- контрольная подвыборка длиной 1: $\{ (x_i, y_i) \}$.

Далее минимизируется критерий:

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N LE_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - LV_i), \quad (6)$$

где LE_i – ошибка вычисленная на контрольной подвыборке для i -го разбиения, LV_i – прогноз модели в точке x_i при обучении по выборке S^i [10].

Однако такая минимизация приведет к большому объему вычислений. Покажем, как избежать этого.

Определим вектор Y^i следующим образом:

$$y_j^i = \begin{cases} y_j, & j \neq i \\ LV_i, & j = i \end{cases} \quad (7)$$

Можно показать что $LV_i = \left(K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y^i \right)_i$. Тогда:

$$LV_i - f_S(x_i) = \sum_j (K \cdot K^{-1}(\lambda))_{ij} (y_j^i - y_j) =$$

$$= (K \cdot K^{-1}(\lambda))_{ii} (LV_i - y_i), \quad (8)$$

где $f_S(x_i) = (K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y)_i$, т.е. прогноз модели в точке x_i при обучении по всей обучающей выборке. Тогда, перегруппировав слагаемые, получаем, что

$$LV_i = \frac{(K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y)_i - (K \cdot K^{-1}(\lambda))_{ii} y_i}{1 - (K \cdot K^{-1}(\lambda))_{ii}} \quad (9)$$

или в векторном представлении:

$$LV = \frac{K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y - \text{diag}_m(K \cdot K^{-1}(\lambda)) \cdot Y}{\text{diag}_v(I - (K \cdot K^{-1}(\lambda)))}. \quad (10)$$

Здесь в (10) деление происходит поэлементно; $\text{diag}_m(M)$ обозначает матрицу, на диагонали которой находятся числа M_{ii} ; $\text{diag}_v(M)$ обозначает вектор, состоящий из элементов M_{ii} .

Соответственно вектор ошибок скользящего контроля будет иметь вид:

$$LE = Y - LV =$$

$$= Y + \frac{\text{diag}_m(K \cdot K^{-1}(\lambda)) \cdot Y - K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y}{\text{diag}_v(I - (K \cdot K^{-1}(\lambda)))} = \quad (11)$$

$$= \frac{Y - K \cdot K^{-1}(\lambda) \cdot Y}{\text{diag}_v(I - (K \cdot K^{-1}(\lambda)))} = \frac{(I - K \cdot K^{-1}(\lambda)) \cdot Y}{\text{diag}_v(I - (K \cdot K^{-1}(\lambda)))}$$

Кроме того, используя сингулярное разложение матрицы K , получим оценку:

$$K \cdot K^{-1}(\lambda) = Q\Lambda Q^T Q(\Lambda + \lambda I)^{-1} Q^T =$$

$$= Q(\Lambda + \lambda I - \lambda I)(\Lambda + \lambda I)^{-1} Q^T = \quad (12)$$

$$= I - \lambda K^{-1}(\lambda).$$

Или

$$I - K \cdot K^{-1}(\lambda) = \lambda K^{-1}(\lambda). \quad (13)$$

Подставив (13) в (11), получим:

$$LE = \frac{\lambda K^{-1}(\lambda) Y}{\text{diag}_v(\lambda K^{-1}(\lambda))} = \frac{\alpha}{\text{diag}_v(K^{-1}(\lambda))}, \quad (14)$$

где, строго говоря, α также зависит от параметра λ .

Таким образом, вычислительная сложность вычисления критерия 2-го уровня резко уменьшается.

Итоговый алгоритм

Для рекуррентной идентификации нелинейных систем можно воспользоваться следующей схемой:

1. На первом этапе строится матрица $K_{n,r}$, а также её сингулярное разложение $K = Q\Lambda Q^T$.
2. Далее, используя соотношение (14), методом линейного поиска в интервале $[\Lambda_{\min}; \Lambda_{\max}]$ оценивается наилучший параметр регуляризации λ .
3. По формулам (4) рекуррентно пересчитываем матрицу $K_{n,r}(\lambda)$.
4. В моменты времени, когда рекуррентный прогноз приводит к большим ошибкам, необходимо вначале пересчитывать параметр регуляризации, воспользовавшись пунктом 2, а затем корректировать матрицу $K_{n,r}(\lambda)$.

Выводы

Предложенный подход позволяет получать устойчивые и эффективные в вычислительном отношении решения задачи рекуррентной идентификации в реальном масштабе времени.

Существенное влияние на работу алгоритма оказывают такие настроечные параметры: r – количество опорных векторов и m – размерность вложения, оценка которых должна производиться на подготовительном этапе работы алгоритма. С одной стороны, это сужает область применения разработанного алгоритма, с другой стороны, изменение этих параметров сигнализирует о существенном изменении структуры системы.

Также представляет интерес конструирование более точного и статистически обоснованного критерия для пересчета параметра регуляризации. В этом случае также появится возможность сегментирования рассматриваемого временного ряда в реальном масштабе времени.

Список литературы

1. *Detecting strange attractors in turbulence*, / F Taken, D. Rang, L.S. Young (eds) // *Lecture Notes. Mathematics*, 1981. – № 898. – P. 366 – 381.
2. *Embedology* / T. Sauer, J.A. Yorke, M. Casdagli // *J. Stat. Phys.*, 1991. – № 6. – P. 579 – 616.
3. *Determining embedding dimension for phase – space reconstruction using a geometrical construction* / M.B. Kennel, R. Brown, H.D.I. Abarbanel // *Phys.Rev.*, 1992. – № 45 – P. 3403 – 3411.
4. *Procaccia I. Measuring the strangeness of strange attractors* / I. Procaccia // *Physica.*, 1983. – № 9.P. 189 – 208.
5. *Broomhead D.S. Extracting qualitative dynamics from experimental data* / D.S. Broomhead, G.P King // *Physica D.*, 1986 – №20 – P. 217 – 236.
6. Безручко П. *Современные проблемы моделирования по временным рядам* / П. Безручко, Д.А. Смирнов // *Вестник ХПИ*. – X.: НТУ ХПИ, 2007. – Вып. 145. – С. 34 – 45.
7. *Smola A. Learning with kernel* / A. Smola // *Cambridge*. – MA: MIT Press, 2002.
8. *Model selection via bilevel optimization* / J. Hu, X. Ji, G. Kunapuli, and J.-S. Pang // *Proc. IJCNN0*, 2006. – P. 3588 – 3505.
9. *Lyubchik L., Kolbasin V. Kernel-based methods for non-stationary time-series identification and prediction* / L. Lyubchik, V.Kolbasin // *Information Technologies and knowledge*, 2009. – № 3.
10. *Воронцов В. Комбинаторный подход к оценке качества обучаемых алгоритмов* / В. Воронцов Под ред. О.Б. Лупанов. – М.: Физматлит, 2004. – Т.13. – С. 5 – 36.
11. *Javier V., Santamar I. Nonlinear System Identification using a New Sliding Window Kernel RLS Algorithm* / V. Javier, I. Santamar // *Journal of Communications*. – 2007. – № 2.
12. *Online learning with kernels* / J. Kivinen, A.J. Smola, R.C. Williamson // *IEEE Transactions on Signal Processing*. – 2004. – №52. – P. 2165 – 2176.
13. *Ljung L. System Identification: Theory for the User*. Prentice Hall / L. Ljung. – New Jersey, Second edition, 1999.
14. *Dorffner G. Neural networks for time series processing* / G. Dorffner // *Neural Network World* – 1996. – №6(4). – P. 447–468.
15. *Vapnik V. Statistical Learning Theory* / V. Vapnik. – Wiley, New-York, 1998.
16. *Kernel based partially linear models and nonlinear identification* / M. Espinoza, J.A.K. Suykens, and B. De Moor // *IEEE Transactions on Automatic Control*. – 2005. – №50 (10). – P. 1602–1606.
17. *Least Squares Support Vector Machines* / J.A.K. Suykens, T. Van Gestel, J. De Brabanter, B. De Moor, and J. Vandewalle // *World Scientific*, Singapore. – 2002.

Поступила в редакцию 30.06.2012

Рецензент: д-р техн. наук, проф. А.И. Стрелков, Харьковский университет Воздушных Сил им. И. Кожедуба, Харьков.

**РЕКУРЕНТНЕ ОЦІНЮВАННЯ МАТРИЦІ ГРАММА
ПРИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ НЕЛІНІЙНИХ НЕСТАЦІОНАРНИХ ДИНАМІЧНИХ СИСТЕМ**

Л.М. Любчик, В.А. Колбасин

Розглянуто задачу рекурентною ідентифікації нелінійної нестационарної динамічної системи на основі ядерних методів в реальному масштабі часу. На основі методу ковзний контроль запропоновано алгоритм 2-го рівня для оцінки параметра регуляризації. Запропоновано спосіб обчислення критерію якості для алгоритму другого рівня.

Ключові слова: ядерні методи, матриця Грамма, регуляризації, ковзний контроль рекурентні алгоритми..

**RECURRENT ESTIMATION OF TRANSFER GRAM MATRIX
FOR IDENTIFICATION OF NONLINEAR NONSTATIONARY DYNAMIC SYSTEMS**

L. M. Lyubchyk, V.A. Kolbasin

The problem of recursive identification of nonlinear time-dependent dynamical systems based on nuclear techniques in real time. On the basis of a sliding control algorithm level 2 to estimate the regularization parameter. The way of calculation of the quality criterion for the algorithm of the second level.

Keywords: nuclear techniques Gram matrix, regularization, cross-validation, recursive algorithms.