https://doi.org/10.31649/1997-9266-2020-151-4-74-88

УДК 004.8+519.72

В. Я. Гальченко[1]
Р. В. Трембовецька[1]
В. В. Тичков[1]
А. В. Сторчак[1]

МЕТОДИ СТВОРЕННЯ МЕТАМОДЕЛЕЙ: СТАН ПИТАННЯ

[1]Черкаський державний технологічний університет

Проведено узагальнення результатів сучасних досліджень в галузі математичного моделювання з використанням відомих методів побудови метамоделей, тобто сурогатних моделей, для ресурсоємних в сенсі обчислювальних затрат та часу задач, визначення їх переваг та недоліків, особливостей застосування на практиці. Проведено класифікацію за ознакою застосованого методу створення метамоделей, оцінювалися трудомісткість та доцільність використання різних технік. Особлива увага приділялася побудові метамоделей для багатовимірних складних за топологією гіперповерхонь відгуку. Критично розглядалися геометричні, стохастичні, та евристичні класи застосовуваних метамоделей. Як представникам класу геометричних метамоделей сконцентрована увага приділялася поліноміальним та сплайн-метамоделям. Наведено короткий опис головних ідей їх побудови, необхідний математичний апарат реалізації, перелічено недоліки та переваги коректного практичного використання в числових експериментах. Аналогічним чином розглядалися стохастичні сурогатні моделі, до яких доцільно віднести регресійні моделі на основі гаусівських процесів або крігінг-моделі та моделі на радіально-базисних функціях. Також розглянуто клас евристичних метамоделей, до складу якого входять моделі на штучних нейронних мережах, моделі з використанням методу групового урахування аргументів та машин опорних векторів. Аналізу підлягали регресійні моделі на основі радіально-базисних нейронних мереж та багатошарових персептронів. Узагальнено і систематизовано результати теоретичних досліджень щодо сурогатних моделей з використанням множинних нейронних мереж, тобто асоціативних машин. Наведено особливості побудови цих машин статичної структури з різноманітними методами отримання колективного узгодженого для композиту мереж рішення, зокрема з усередненням по ансамблю та підсиленням. Зазначено ефективність підвищення точності апроксимаційних можливостей метамоделей за допомогою гібридних технік одночасного використання технологій нейронних мереж та адитивної регресії, декомпозиції області пошуку. Показано, що для гіперповерхонь відгуку складної топології з метою підвищення точності апроксимації має сенс використання гібридного підходу, що полягає в одночасному застосуванні технологій декомпозиції області пошуку та нейронних мереж, побудованих на техніках асоціативних машин з різними методами отримання рішення.

Ключові слова: гіперповерхня відгуку, апроксимація, ресурсоємність, метамодель, геометричні метамоделі, стохастичні метамоделі, евристичні метамоделі, нейронні мережі, адитивна регресія, асоціативні машини.

Вступ

Сурогатне моделювання є одним з поширених напрямків розвитку методів розв’язання складних обернених задач в багатьох сферах науки та техніки, зокрема в оптимальному синтезі конструкцій об’єктів, неруйнівному контролі матеріалів та виробів, ідентифікації властивостей досліджуваних об’єктів у разі їх взаємодії з різноманітними фізичними полями, технічній діагностиці тощо. Зазвичай такі задачі потребують застосування оптимізаційних методів, що використовують цільові функції, які характеризуються великою обчислювальною ресурсоємністю. В таких випадках цільові функції часто обчислюються за допомогою досить «важких» в сенсі затрат часу чисельних методів, що призводить до практично непереборних перешкод. Заміна ресурсоємної цільової функції її апроксимованим аналогом, тобто метамоделлю або моделлю-замісником (рис. 1), яка відрізняється значно більшою обчислювальною продуктивністю, дає можливість пошуку розв’язку оптимізаційної задачі за реальний час [1], [2]. Така обчислювальна технологія ілюструється схемою на рис. 2. В задачах ідентифікації метамоделі додатково ще виконують функції

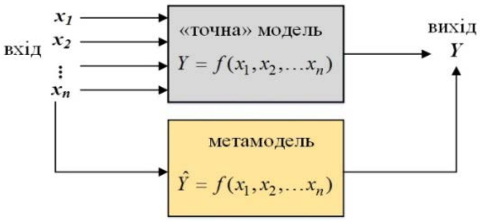


Рис. 1. Метамодель як модель на модель, створену за фізичними законами

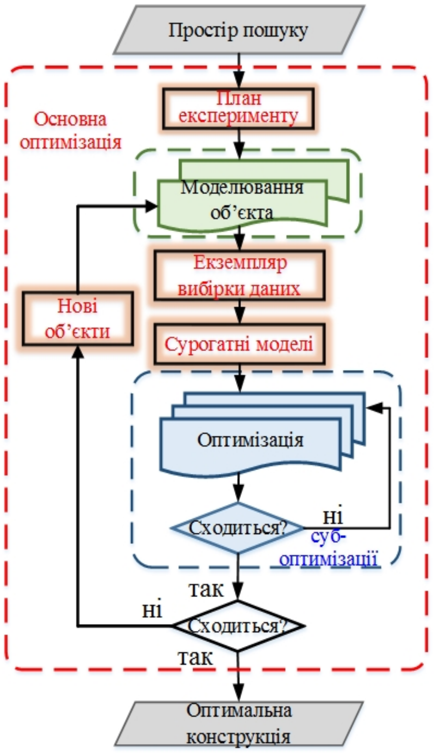


Рис. 2. Узагальнений алгоритм сурогатної оптимізації

накопичувачів апріорної інформації, яка отримана попередньо щодо досліджуваних об'єктів шляхом комп'ютерних чисельних експериментів, проведених за відповідними доцільними планами. Створені таким чином носії інформації надалі використовуються безпосередньо у вимірювальних операціях, що дозволяє забезпечити розв'язання обернених задач в реальному масштабі часу. Останніми роками такий підхід зі створенням метамоделей застосовується в різноманітних галузях для вирішення складних проектних завдань: в машинобудуванні [3], [4], аерокосмічній промисловості [5], турбінобудуванні, будівництві [6].

Таким чином, під метамоделлю або сурогатною моделлю розуміють просту в обчислювальному сенсі формальну модель на складнішу модель, побудовану на фізичних законах, тобто вона є моделлю на модель. Загалом задача побудови сурогатної моделі зводиться до побудови апроксимаційної функції гіперповерхні відгуку, що визначається моделлю на фізичних законах. Це непроста задача та іноді, в складних випадках, потребує застосування комбінованих методів апроксимації, які поєднують в собі методи штучного інтелекту і традиційні математичні методи наближення та аналізу даних.

Розвиток теорія метамоделювання отримала у дослідженнях вчених G. G. Wang, A. Forrester, A. Sobester, A. Keane, S. De Marchi, E. Perracchiono, H. Fang, S. Koziel, А. П. Кулешов, А. В. Бернштейн, Е. В. Бурнаев та іншими.

Загальна концепція побудови сурогатних адаптивних моделей розглянута в роботах [1], [7] і передбачає:

– характеристику об'єкта за допомогою «точної» математичної моделі;

– створення наближеної моделі, яка дозволяє обчислювати приблизне значення характеристики об'єкта на основі вхідних даних. Невід'ємним компонентом цього етапу є створення комп'ютерного плану обчислювального експерименту, на основі якого виконується побудова регресійної моделі;

– валідацію та оцінювання точності створеної сурогатної моделі.

Таким чином, виникає необхідність узагальнення матеріалів сучасних досліджень з використанням існуючих методів побудови метамоделей для технічних задач в різноманітних галузях, визначення їх переваг та недоліків, особливостей застосування на практиці, що і є *метою дослідження*.

Літературний огляд та аналіз методів створення метамоделей

Наявні різноманітні методи побудови метамоделей, які використовуються науковцями, можна класифікувати варіантом, показаним на рис. 3.

При цьому можна виділити узагальнені класи найзастосовуваніших метамоделей, а саме геометричних, стохастичних та евристичних, та відповідних методів їх побудови. Зазначимо, що методи створення метамоделей, які використовуються для технічних задач, відрізняються різноманітними підходами до апроксимації та складністю їх реалізації. Згідно з наведеною класифікацією до першої групи методів побудови метамоделей відносять геометричні, до яких належать всі види поліноміальних моделей та сплайн-моделі: багатоваріантні адаптивні регресійні сплайни MARs (Multivariate adaptive regression splines), кубічні сплайни (Cubic splines), неоднорідні раціональні B-сплайни NURBs (Non-uniform rational B-splines).

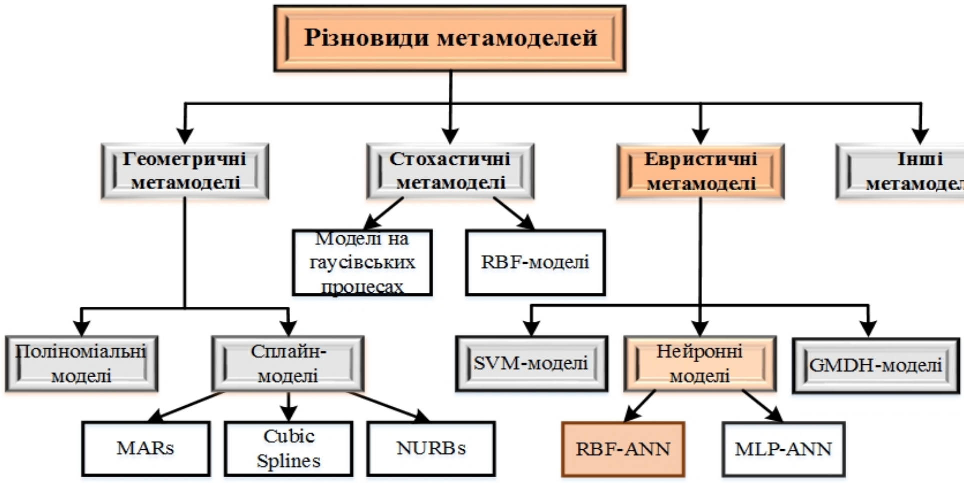


Рис. 3. Різновиди методів апроксимації, що застосовуються для побудови метамоделей: MARs — багатоваріантні адаптивні регресійні сплайни; Cubic splines — кубічні сплайни; NURBs — неоднорідні раціональні В-сплайни; RBF-ANN — нейронна мережа на радіально-базисних функціях; MLP-ANN — багатошаровий персептрон; SVM — метод опорних векторів; GMDH — метод групового врахування аргументів

Геометричні метамоделі

Поліноміальні моделі, як одні з найпоширеніших, застосовуються науковцями для розв’язання різноманітних задач [3], [4]. Поліноміальна модель отримується, на відміну від лінійної, внесенням додаткових предикторів шляхом піднесення кожного початкового предиктора до певного степеня. Залежність між предикторами і відгуком описується в загальному вигляді регресійною функцією

$$y = b_0 + b_1 \cdot f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) + \ldots + b_{m-1} \cdot f_{m-1}(x_1, x_2, \ldots, x_m) + \varepsilon., \quad (1)$$

де $f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, $I = 1, \ldots, m-1$ — задані функції факторів $x_1, x_2, \ldots, x_n$, $b_0, b_1, \ldots b_{m-1}$ — коефіцієнти математичної моделі, ε — залишок або випадкова складова.

В залежності від вибраної функції $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ регресійна модель може бути представлена по-різному. Наприклад, для однофакторної поліноміальної регресії функція має вигляд

$$y = b_0 + b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2 + \ldots + b_{m-1} \cdot x^{m-1} + \varepsilon, \quad (2)$$

а поліноміальна модель 2-го порядку для трьох факторів містить головні ефекти (тобто ефекти першого порядку) та квадратичні ефекти (тобто ефекти другого порядку) і має вигляд

$$y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_1^2 + b_3 \cdot x_2 + b_4 \cdot x_2^2 + b_5 \cdot x_3 + b_6 \cdot x_3^2 + \varepsilon. \quad (3)$$

Коефіцієнти математичної моделі оцінюються методом найменших квадратів. Зазвичай степінь поліному більше ніж 3 або 4 не використовується, оскільки в такому випадку поліноміальна крива стає надмірно гнучкою і приймає неадекватний вигляд.

Класичний регресійний аналіз передбачає виконання низки передумов [8], які насправді можуть не виконуватися, а їх перевірка достатньо складна, оскільки передбачає проведення складних експериментів і вимагає значних ресурсів на її здійснення. В поліноміальних моделях в залежності від складності гіперповерхні відгуку завжди виникає проблема вибору порядку моделі, яка на практиці вирішується ітеративним методом в бік поступового підвищення з метою уникнення перенасичення.

Одним з методів розв’язання регресійних задач є застосування багатовимірних адаптивних сплайнів MARs, що дозволяє встановлювати вигляд і параметри апроксимаційної функції, з заданою точністю відтворюючої початкові дані [9]. Простір пошуку значень вхідних змінних розбивається на області, в яких використовуються різні базисні функції певних видів та їх добутки з декількох співмножників. В основі роботи методу покладено вибір необхідної зваженої суми базисних функцій з їх загального набору (словника). Алгоритм MARs-сплайнів шукає в просторі всіх вхідних змінних місця розташування вузлових точок, а також взаємозв’язки між змінними. Коефіцієнти розкладання і сам робочий набір базисних функцій вибираються за допомогою ітеративної евристичної процедури включення–виключення, що дає дещо меншу точність апроксимації, ніж за використання повного словника. Метод MARs-сплайнів знаходить шукану залежність у два етапи. Перший етап полягає в додаванні базисних функцій до робочого набору, доки не буде мінімізовано загальний критерій якості моделі [9] або ж буде досягнута максимальна кількість базисних функцій. На другому етапі з робочого набору видаляються функції, які не впливають суттєво на критерій точності моделі, що відображає зростання дисперсії з ростом числа базисних функцій. Для розрахунку невідомих коефіцієнтів розкладання використовують метод найменших квадратів.

В роботі [10] розглядаються модельні приклади із застосуванням кусково-лінійних базисних функцій. Цей метод ефективний не тільки для розгляду функції однієї змінної, але і для багатовимірних просторів. Досліджено залежність похибки при навчанні і контролі від кількості базисних функцій, причому як на етапі додавання, так і на етапі видалення функцій з моделі [10].

В роботі [11] автори запропоновували спеціальний метод розв'язання задачі апроксимації за допомогою розкладання по структурно-орієнтованому словнику функцій. В основі методу лежить використання тензорного добутку словників функцій, побудованих в кожному з факторів, і спеціального штрафу на мінливість моделі, який дозволяє досягти контролю гладкості апроксимації. Розв'язання задачі апроксимації зводиться до пошуку оптимального тензора коефіцієнтів розкладання за словником для вибірок спеціальної структури. Також для випадку вибірок, що мають структуру неповного декартового добутку довільного числа багатовимірних факторів, розроблено метод знаходження оптимального тензора коефіцієнтів за словником та показана його висока обчислювальна ефективність.

Маючи деякі переваги перед класичними статистичними методами побудови апроксимаційної моделі, MARs все ж є чутливим до початкових вхідних даних. Крім того, метод має значні часові затрати на розрахунок коефіцієнтів моделі методом найменших квадратів у випадку розв'язання задач великої розмірності.

Стохастичні метамоделі

Представником стохастичних методів побудови сурогатних моделей є регресія на основі гаусівських процесів (або крігінг) [12], що дозволяє створювати нелінійні апроксимаційні моделі. Методи побудови сурогатних моделей на основі гаусівських процесів та їх застосування в задачах оптимізації розглядаються в роботах [13] і [14]. Відомо, що будь-який випадковий процес визначається середнім значенням та коваріаційною функцією. У разі використання реальних даних коваріаційна функція гаусівського процесу невідома. Тому вводиться припущення, що коваріаційна функція належить до деякого параметричного сімейства. В залежності від апріорних уявлень про вигляд апроксимаційної залежності вибирається сімейство коваріаційних функцій. Так в роботі [15] передбачалося, що коваріаційна функція належить до експоненціального сімейства, а в [16] — до сімейства на основі відстані Махалонобіса. Коваріаційна функція другого сімейства дозволяє створити модель загальнішу, проте обмежує роботу з даними великої розмірності, оскільки значно збільшується кількість параметрів коваріаційної функції, які необхідно оцінити. У зв'язку з цим в роботі [16] вирішується актуальне завдання розробки алгоритму налагодження параметрів коваріаційної функції на основі відстані Махалонобіса, який дозволяє виконувати ці дії і для випадку даних великої розмірності. У порівнянні методів у двовимірному випадку стандартний і запропонований авторами [16] алгоритми налагодження параметрів коваріаційної функції мають однакову точність. Зі збільшенням розмірності стандартний метод з використанням відстані Махаланобіса має суттєво меншу точність у порівнянні із запропонованим алгоритмом повороту координатних осей [16], оскільки збільшується кількість гіперпараметрів, які необхідно визначати в процесі навчання.

З метою зменшення обчислювальних затрат та підвищення точності оцінювання параметрів моделі, в роботі [15] пропонується метод моделювання нестаціонарної коваріаційної функції на основі лінійного розкладання по словнику параметричних функцій та використання байєсівської регуляризації. Для байєсівської регуляризації за відомі розподіли параметрів використовуються нормальний та гама-розподіл. Обидва розподіли дозволяють уникати виродження апроксимації, збільшувати узагальнювальну здатність і надійність алгоритмів. Використовуючи метод, слід враховувати, що для побудови моделі на основі гаусівських процесів необхідно оцінити вектор параметрів коваріаційної функції, трудомісткість такої оцінки складає $O(n^3)$. Регресія на основі гаусівських процесів передбачає наявність заздалегідь заданої коваріаційної функції, яка необхідна для оцінювання параметрів цих процесів, що, відповідно, впливає на обчислювальну складність методу. Розрахунок параметрів моделі виконується методом максимальної правдоподібності, який передбачає виконання досить громіздких матричних перетворень, що суттєво впливає на затрати часу зі збільшенням розмірності задачі.

У разі, коли є великий масив вихідних даних, найчастіше використовуються регресійні RBF-моделі, які так само створюються застосуванням стохастичних методів побудови [17], [18]. Радіальна базисна функція апроксимації використовує лінійні комбінації K радіально-симетричних функцій φ

$$f(x)=\sum_{j=1}^{K}\lambda_j\cdot\varphi\left(\left\|x\text{-}c^{(j)}\right\|\right), \tag{4}$$

де $\lambda=\left[\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_K\right]^T$ — вектор параметрів моделі, x — вектор проектних змінних, φ — базисна функція, $c^{(j)}$, $j=1\ldots k$ — відомі центри базисних функцій.

Параметри моделі λ визначаються аналогічно, як і у випадку поліноміальної регресії. Тобто функція апроксимації $f(x)$ є лінійною комбінацією деяких базисних функцій з відповідними ваговими коефіцієнтами. Найзастосовніші базисні функції — лінійна, кубічна, полігармонічний сплайн, TPs–сплайни (Thin Plate splines або сплайн-поверхні) [17], [18]. Проте більшу гнучкість мають параметричні базисні функції, наприклад, гаусівська, зворотна квадратична, мультиквадратична, зворотна мультиквадратична та інші [17]. Розрахунок вектора параметрів моделі виконується методом найменших квадратів, що в задачах великої розмірності вимагає суттєвих обчислювальних ресурсів.

Евристичні метамоделі

Розглядаючи клас евристичних метамоделей, можна виділити штучні нейронні мережі (ANN), моделі з використанням методу групового урахування аргументів МГУА (GMDH) та машин опорних векторів (SVM). Послідовно розглянемо кожний з цих методів.

Потужним апаратом для апроксимації складних залежностей є штучні нейронні мережі (НМ) [19], а саме НМ на радіально-базисних функціях RBF-ANN та багатошарових персептронах MLP-ANN. Універсальні апроксимаційні властивості НМ та відсутність вимог попереднього «точного, жорсткого» задання вигляду моделі є причиною їх широкого застосування при створенні метамоделей у складних випадках топології гіперповерхні відгуку [20], [21]. Відсутність «жорстко» заданого апріорного зв’язку шуканого розв’язку з конкретною моделлю надає переваги НМ, оскільки вона виявляється пристосованішою до роботи в умовах невизначеності. Основні переваги НМ головним чином зумовлені: навчанням на прикладах; підвищенням завадостійкості до зашумлених та суперечливих даних; стійкістю до помірних змін побічних параметрів об’єкта, які не є шуканими в процесі розв’язку. Разом з тим їм притаманні і деякі недоліки, один з яких це відносно великий час для навчання мережі та відсутність аналітичного запису отриманої апроксимаційної функції.

В класифікації нейронних мереж виділяють два фундаментальні класи: мережі прямого розповсюдження (одношарові та багатошарові) та рекурентні мережі або мережі зі зворотним зв’язком [19], [22], але практичне застосування в апроксимаційних задачах знайшли перші з них. Завдяки великій кількості алгоритмів і методик навчання та багатьох видів функцій активації досягається створення великого розмаїття НМ.

Теоретичною основою і обґрунтуванням того, що НМ здатна апроксимувати будь-яку функціональну залежність є теорема Колмогорова–Арнольда про універсальну апроксимацію [19]. Будь-яка неперервна функція K аргументів в одиничному кубі $[0,1]^K$ може бути представлена у вигляді суперпозицій неперервних функцій одного аргументу і операції додавання

$$F\left(x_1,x_2,\ldots,x_k\right)=\sum_{i=1}^{N}a_i\cdot f\left(\sum_{k=1}^{K}a_{ik}\cdot x_k+a_{0k}\right), \tag{5}$$

де $(x_1, x_2, \ldots, x_k)^T$ — вектор вхідних даних, $f(\cdot)$ — обмежена, не постійно монотонно висхідна неперервна функція, K — кількість вхідних вузлів, N — кількість нейронів прихованого шару, a_{ik} — синаптичні ваги прихованого шару, a_i — синаптичні ваги вихідного шар, a_{0k} — зміщення.

В основі побудови RBF-мереж покладено розбиття простору пошуку гіперсферами, які задаються своїм центром та радіусом. RBF-мережа має у своєму складі: вхідний шар, що з’єднує мережу з середовищем спостереження; прихований шар (або проміжний), що складається з елементів з ядерними базисними функціями активації; лінійний вихідний шар — звичайний одношаровий персептрон, який в результаті налаштування ваг визначає вихід мережі [19], [22]. В якості функції активації нейронів прихованого шару часто використовують функцію Гауса, але можливі й інші різновиди функцій, наприклад, квадратична ядерна функція, ядро Єпанечникова, зворотна мультиквадратична функція, сплайн-функція, функція Коши. Із застосуванням гаусівської функції активації вихід мережі формується як лінійна комбінація виходів нейронів прихованого шару і описується виразом

$$u(\vec{x}) = \sum_{k=1}^{m} w_k \cdot \varphi_k(\vec{x}) = \sum_{k=1}^{m} w_k \cdot \exp\left(-\frac{r_k^2}{a_k^2}\right), \tag{6}$$

де $\vec{x}$ — вхідний вектор $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots x_l)^T$, $r_k = \|\vec{x} - \vec{c}_k\| = \sqrt{(x_1 - c_{x_1 k})^2 + (x_2 - c_{x_2 k})^2 + \ldots + (x_l - c_{x_l k})^2}$ — радіус k-го нейрона, l — кількість змінних цільової функції, m — кількість нейронів прихованого шару, w_k — вага зв'язку вихідного нейрона з k-м нейроном прихованого шару, $\vec{c}_k$ — вектор координат центру k-го нейрона, який містить координати $(c_{x_1 k}, c_{x_2 k}, \ldots, c_{x_l k})^T$, a_k — ширина k-го нейрона, $\varphi_k(\vec{x})$ — гаусівська функція активації прихованого шару.

Задача апроксимації RBF-мережею зводиться до оптимального вибору ваг вихідного шару, кількості радіальних функцій (нейронів), а також їх параметрів: центрів розташування цих функцій та їх ширини, які є нелінійними параметрами прихованого шару. До переваг нейронних RBF-мереж відносять те, що вони мають лише один прихований шар нейронів, який істотно спрощує характерну для складніших НМ задачу вибору кількості прихованих шарів і робить цей вибір визначеним. Також ці мережі швидко навчаються, що зумовлено можливістю застосування добре вивчених методів лінійної оптимізації при підборі параметрів лінійної комбінації у вихідному шарі мережі. Але розмірність RBF-мереж експоненційно зростає зі збільшенням розмірності вихідних даних, а при їх навчанні є необхідність використання великої кількості прикладів. Крім того, RBF-мережа не здатна до екстраполяції даних при збільшенні ширини діапазону вхідних даних.

Багатошаровий персептрон прямого розповсюдження складається з множини сенсорних елементів (вхідних вузлів та вузлів джерела), які утворюють вхідний шар; одного або декількох прихованих шарів обчислювальних нейронів та одного вихідного шару. Вхідний сигнал розповсюджується мережею в прямому напрямку, від шару до шару. Навчання з «учителем» такої мережі виконується за допомогою алгоритму зворотного розповсюдження помилки, який ґрунтується на корекції похибок. В загальному випадку це відповідає популярному алгоритму адаптивної фільтрації — алгоритму мінімізації середньоквадратичної похибки. Існують також і інші алгоритми навчання MLP–мереж, які використовують різноманітні стратегії найшвидшого просування до точки мінімуму [19], [22], наприклад, спуск по спряженим градієнтам і метод Левенберга–Марквардта.

Багатошарові персептрони мають декілька відмінних ознак:

– кожен нейрон мережі має гладку нелінійну функцію активації, наприклад, гіперболічного тангенса. Найбільш розповсюджена форма такої функції є сигмоїдальна, яка визначається логістичною функцією. Теоретично доведено, що з використанням таких найпростіших перетворень можна наближувати достатньо складні багатовимірні функції, і, як наслідок, оцінювати складні залежності;

– мережа містить один або декілька шарів прихованих нейронів, які не належать до входу або виходу мережі. Ці нейрони дозволяють мережі навчатися розв'язувати складні задачі, послідовно враховуючи важливі ознаки з вхідного вектора;

– мережа має високий ступінь зв'язаності, що реалізується за допомогою синаптичних з'єднань. Зміна рівня зв'язаності мережі вимагає зміни множини синаптичних з'єднань або їх вагових коефіцієнтів.

У загальному вигляді вихід двошарової та тришарової MLP-мережі з прямими зв'язками, яких є достатньо для апроксимації практично будь-яких гіперповерхонь, описується такими виразами:

$$y_i(t) = f_2\left(a_{20i} + \sum_{i=1}^{N} a_{2i} \cdot f_1\left(\sum_{k=1}^{K} a_{1k} \cdot x_k(t) + a_{10k}\right)\right), \tag{7}$$

$$y_m(t) = f_3\left(a_{30m} + \sum_{m=1}^{M} a_{3m} \cdot f_2\left(a_{20i} + \sum_{i=1}^{N} a_{2i} \cdot f_1\left(\sum_{k=1}^{K} a_{1k} \cdot x_k(t) + a_{10k}\right)\right)\right), \tag{8}$$

де i = 1, 2,…N — кількість нейронів другого шару, k = 1, 2,…K — кількість нейронів першого шару, m = 1, 2,…M — кількість нейронів третього шару, f_1, f_2, f_3 — функції активації першого, другого та третього шарів, відповідно, a_{10k}, a_{20i}, a_{30m} — початкові збудження k-го, i-го, m-го нейронів першого, другого та третього шарів, відповідно, a_{1k}, a_{2i}, a_{3m} — вагові коефіцієнти k-го нейрону першого шару, i-го нейрону другого шару, m-го нейрону третього шару, $x_k(t)$ — k-та координата вхідного вектора, $y_i(t)$, $y_m(t)$ — i-та, m-та координата вихідного вектора для двошарової НМ та тришарової, відповідно.

Поєднання позитивних різноманітних властивостей MLP-мереж разом, з урахуванням їх здатності до навчання, забезпечує суттєву обчислювальну потужність регресійного багатошарового персептрона. Водночас це є причиною неповноти знань про поведінку таких мереж. Застосування MLP-мережі передбачає крім вибору алгоритму навчання, необхідність застосування різноманітних методів оптимізації структури мережі для кожної конкретної задачі. Окрім того, MLP-мережі мають складну процедуру навчання, оскільки необхідно разом навчати декілька шарів нейронів.

Ефективними методами підвищення точності метамоделей є використання множинних нейронних мереж, тобто асоціативних машин (комітетів нейронних мереж) [19], [22]. В цьому випадку складні регресійні задачі розв'язуються розбиттям на множину простіших задач з меншими вимогами до точності з подальшим об'єднанням отриманих розв'язків в єдиний. Для задач регресії використовуються асоціативні машини статичної структури з відповідними методами отримання розв'язків, а саме з усередненням по ансамблю та підсиленням (boosting) [23].

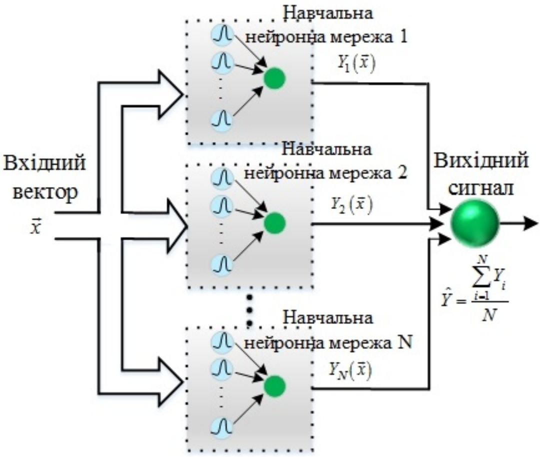


Рис. 4. Комітет нейронних мереж, заснований на усередненні по ансамблю

Далі розглянемо статичну структуру комітету НМ з усередненням по ансамблю (рис. 4), як найпростішу в реалізації та досить ефективну за точністю апроксимації. В такому випадку передбачається, що окремі мережі ймовірно будуть мати різні локальні мінімуми поверхні відгуку. В результаті чого деяка комбінація їх вихідних сигналів призведе до підвищення ефективності композитної мережі. Поєднання вихідного сигналу здійснюється за допомогою лінійної комбінації вихідних сигналів окремих НМ.

В розглянутому вище методі всі мережі навчаються на тій самій множині даних і відрізняються одна від одної тільки вибором початкового стану. На противагу цьому мережі, що працюють на основі методу підсилення, навчаються на прикладах, які мають різні розподіли. Тоді окремі мережі, що можуть використовувати досить «слабкий» алгоритм навчання, в результаті спільного врахування виходів перетворюються в композит НМ, який досягає довільно заданої точності.

Метод підсилення реалізовується трьома способами [19]: підсиленням шляхом фільтрації (boosting by filtering), підсиленням шляхом формування підвибірок (boosting by subsampling), підсиленням шляхом перезважування (boosting by reweighting). Серед недоліків методу підсилення можна відзначити такі, як необхідність великої кількості прикладів навчальних вибірок та потреба в значних обчислювальних ресурсах для підтримки і навчання НМ [19], [24].

Детальніше розглянемо реалізацію методу підсилення шляхом формування підвибірок (boosting by subsampling). В такому випадку потрібна множина прикладів навчання фіксованого розміру. Підвибірки створюються під час навчання згідно із заданим розподілом ймовірності. Одна з найвідоміших процедур, що реалізує формування підвибірок — це, так звана, процедура беггінг (bagging) [22]. В основі цієї процедури покладена ідея, основана на тому, що навіть невеликі зміни в навчальній множині формують декілька абсолютно різних НМ-моделей. Внесення випадкових змін до масиву навчальної вибірки необхідно з метою подальшого створення декількох альтернативних моделей, які основані на різних підмножинах даних. Такий стохастичний метод побудови НМ передбачає, що базові алгоритми навчаються незалежно один від одного на випадково відібраних підмножинах навчальної вибірки, використовуючи так звані бутстреп-вибірки (bootstrap) [19], [22].

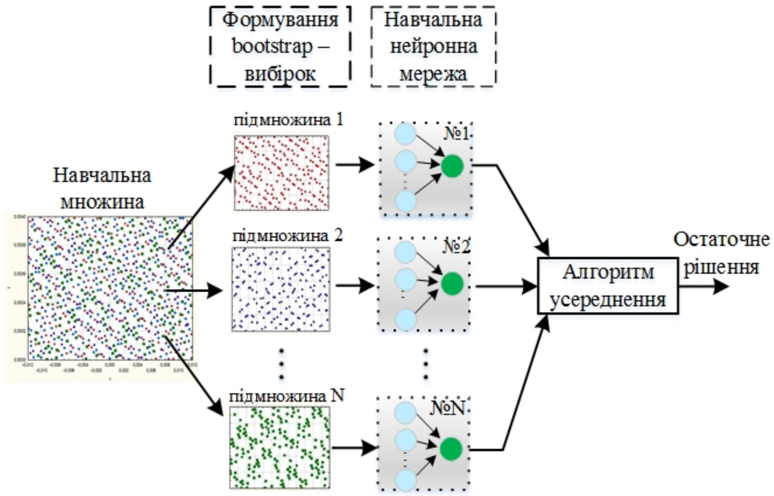


Рис. 5. Структурна схема процедури беггінга

В цій процедурі формування вибірок здійснюється випадково і тому деякі дані можуть брати участь у навчанні декілька разів, а інші — ні разу (рис. 5). Елементи, що не потрапили в чергову вибірку, використовуються як тестові множини для поточної НМ. Наступним кроком є побудова комітету НМ на сформованих таким чином підмножинах вихідних даних. Результати функціонування отриманих алгоритмів поєднуються в композицію за допомогою простого або зваженого середнього. Похибка визначається відносно фіксованої множини прикладів навчання. Основним недоліком такого методу формування вибірок є те, що отримані підмножини даних залежні, оскільки формуються з однієї множини вихідних даних, хоча й відрізняються одна від одної.

На основі бустинга розроблені альтернативні методи побудови ансамблів НМ, які отримали назву адитивної регресії та стекінг (stacking) [22].

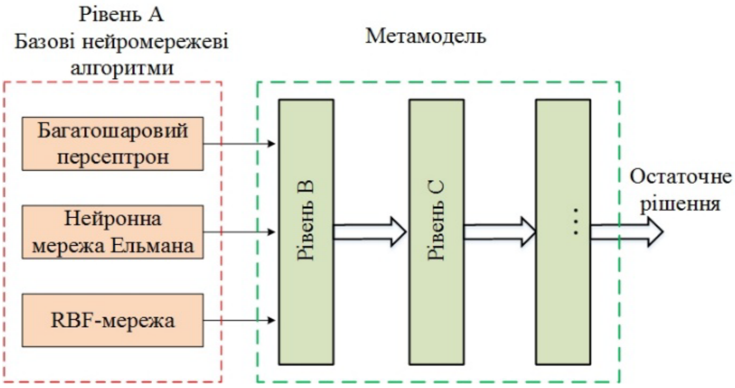


Рис. 6. Структурна схема стекінга

Спосіб створення стекінг-метамоделей використовується, коли за нейромережі використано різноманітні їх поєднання: багатошаровий персептрон, мережа Хопфілда, сігма-пі мережа та інші (рис. 6). Тобто, у цьому випадку використовується декілька алгоритмів, що приймають рішення, і зазвичай процедура полягає у визначенні компетентності кожного алгоритму та виборі кращого з них, який і буде надалі використовуватися для прийняття рішень. На відміну від звичайного підходу, в стекінгу використовується концепція метанавчання, яка дозволяє виявити кращу комбінацію виходів базових моделей. Метанавчання передбачає створення декількох рівнів, так на рівні А застосовуються базові мережі, потім на вхід метамоделі (рівень В) подаються результати виходів із попереднього рівня. Процес продовжується допоки не буде виконана умова припинення роботи алгоритму, а саме — досягнення необхідної заданої точності або використання всіх можливих обчислювальних ресурсів [22]. Основним недоліком моделі стекінга є те, що зі збільшенням рівнів метамоделі швидко зменшуються обчислювальні ресурси.

Зрештою розглянемо основні принципи побудови та функціонування адитивних регресійних метамоделей. Поняття «адитивна регресія» відноситься до будь-яких методів, що основані на комбінуванні (додаванні) вкладів від декількох регресійних моделей. Ідея адитивної регресії полягає в прямому східчастому моделюванні (forward stagewise additive modeling), основні етапи виконання якого такі [22], [25]: побудова звичайної регресійної моделі; розрахунок похибки (залишків), отриманої на навчальній множині; мінімізація залишків за допомогою другої моделі, для чого початкові цільові значення замінюються відповідними залишками перед навчанням другої моделі; повторення процесу доти, поки не буде досягнуто необхідної точності остаточної регресійної моделі.

Так в роботах [25], [26] для регресії з метою удосконалення нейромережевого рішення використана адитивна парадигма побудови мережі. Отримана перша НМ використовується для навчання другої, де на етапі навчання застосовується абсолютна похибка апроксимації, яка є результатом обчислень з урахуванням побудованої першої мережі. Ця процедура повторюється додаванням необхідної кількості НМ допоки не буде отримано задовільне значення відносної похибки апроксимації *MAPE*, %.

Така побудова НМ дає поступове зменшення похибки апроксимації від мережі до мережі (рис. 7). Тобто кожна наступна додана НМ апроксимує поверхню похибки. Загальний відгук поверхні z_{Σ} отримується додаванням відгуків від кожного виходу (z^0, z^1, … z^n) нейронних мереж. Необхідна кількість каскадів визначається отриманим значенням *MAPE*, %. Їх нарощування припиняється, коли похибка при додаванні наступного каскаду зменшується до наперед заданого значення.

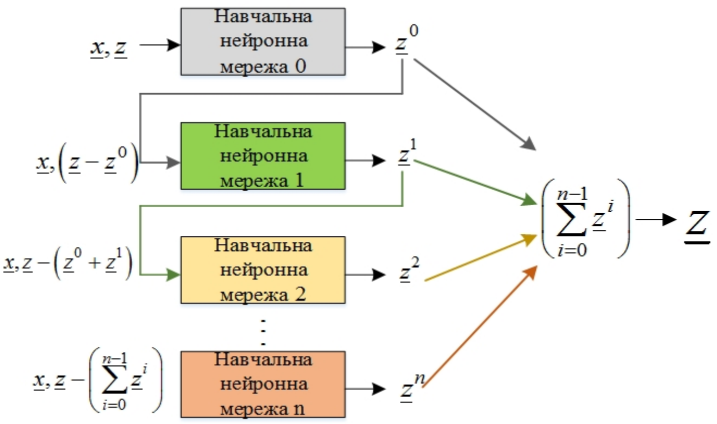


Рис. 7. Схема побудови адитивної регресійної нейромережевої метамоделі

Якщо з використанням запропонованих методів побудови метамоделей не вдається досягти необхідної точності через суттєву нелінійність та нерегулярну поведінку гіперповерхні відгуку, то використовується гібридний підхід, що полягає в одночасному застосуванні технології декомпозиції області пошуку та НМ, побудованих на техніках асоціативних машин з різними методами отримання рішення.

Підхід з декомпозиції області пошуку досить часто використовується в задачах побудови сурогатних моделей, а саме коли необхідно отримати високу їх точність в умовах наявності суттєвої просторової неоднорідності апроксимаційної залежності [2]. Тобто простір пошуку розбивається на декілька підобластей, далі розв'язуються задачі побудови апроксимації в кожній окремій підобласті, після чого кінцева сурогатна модель будується за допомогою «зшивання» складових частин. Така декомпозиція простору пошуку на підобласті за значеннями виходів корисна не тільки для випадку, коли є різні вимоги до точності сурогатної моделі в різних локаціях простору пошуку. Така техніка також має сенс у ситуаціях, коли в деяких підобластях мінливість функції суттєво менша ніж у всьому просторі пошуку. Тобто, якщо побудувати завершальну апроксимацію «зшиванням» часткових апроксимацій, то вдається отримати точнішу сурогатну модель у порівнянні з глобальною сурогатною моделлю, побудованою одразу для всього простору пошуку [2]. Як приклад, на рис. 8 показано архітектуру асоціативної машини, де застосовано адитивний метод побудови метамоделі, а остаточне рішення приймається усередненням по ансамблю тільки на останньому рівні.

Рис. 8. Побудова асоціативних машин адитивним методом з прийняттям рішення усередненням по ансамблю на останньому рівні

А на рис. 9 показано аналогічну мережу, але в ній рішення приймається усередненням по ансамблю на кожному рівні. Реалізації такої побудови мереж щодо створення сурогатних моделей розглянуті в роботах [27], [28], де з метою покращення нейромережевого рішення застосовано також метод підсилення шляхом формування підвибірок (беггінг) [29] та технологію декомпозиції простору пошуку.

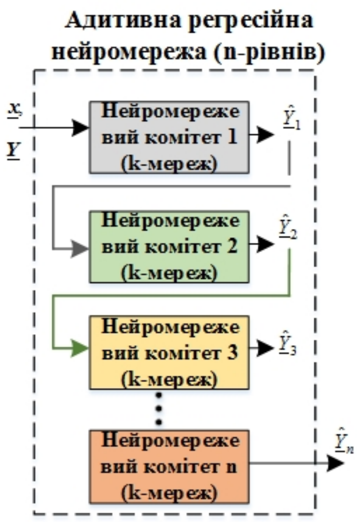


Рис. 9. Побудова асоціативних машин адитивним методом з прийняттям рішення усередненням по ансамблю на кожному рівні

Будь-які утворені структури НМ-метамоделей потребують обов'язкового оцінювання адекватності та інформативності за комплексом статистичних показників, серед яких коефіцієнт детермінації R^2, відношення стандартних відхилень *S.D.ratio*, середня відносна величина модельної похибки *MAPE*, %, сума квадратів залишків SS_R, середній квадрат залишків MS_R. Також з цією метою використовують графічний аналіз залишків у вигляді гістограми та діаграми розсіювання значень для «точної» моделі *Y* та побудованої метамоделі $\hat{Y}$ [30].

Створення МГУА-метамоделей основане на сортуванні поступово ускладнених варіантів моделей з вибором їх оптимальної структури [31], [32]. Цей метод має переваги, коли відсутня або майже відсутня апріорна інформація про структуру моделі і розподіл її параметрів. Ідея методу полягає у формуванні за даними вибірки деякої множини моделей $\hat{y}_f$ різноманітної структури, що мають такий вигляд:

$$\hat{y}_f = f\left(X, \hat{\theta}_f\right), \tag{9}$$

де X — матриця значень змінних, що утворює вибірку спостережень, $\hat{\theta}_f$ — оцінка параметрів моделі.

Далі з отриманої множини моделей $\hat{y}_f$ визначається оптимальна модель f^* за критерієм мінімуму оцінки якості моделі C:

$$f^* = \arg\min C\left(y, \hat{y}_f\right), \tag{10}$$

де y — вектор вихідних значень у вибірці даних.

Оцінки параметрів для кожної моделі є також розв’язанням ще однієї екстремальної задачі. Зв’язок між вхідними і вихідними змінними описується у вигляді функціонального ряду Вольтерра, дискретним аналогом якого є узагальнений поліном Колмогорова–Габора

$$\hat{y}_f = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k \,, \tag{11}$$

де $a_0, a_i, a_{ij}, a_{ijk}$ — коефіцієнти поліному, x_i, x_j, x_k — вхідні змінні, n — кількість вхідних змінних.

Існує чотири базових алгоритми МГУА та велика кількість їх модифікацій: COMBI — комбінаторний алгоритм, MULTI — комбінаторно-селекційний алгоритм, MIA — багаторядний ітеративний алгоритм, RIA — релаксаційний ітеративний алгоритм. Всі базові алгоритми є багаторядними. В кожному ряді може знаходитися декілька моделей, які характеризуються однаковим рівнем складності. Алгоритми відрізняються між собою умовами формування і відбору змінних при переході від одного ряду до іншого.

Ідея COMBI полягає в використанні всіх можливих моделей без їх пропуску, саме тому на кожному рівні складності розглядаються всі моделі і не проводиться селекція кращих комбінацій змінних. Проте його практичне застосування обмежено задачами з невеликою кількістю ознак n, оскільки кількість можливих комбінацій експоненціально збільшується зі збільшенням кількості змінних моделей. Тому в цьому алгоритмі кількість змінних обмежена, $n = 20$. Ідея алгоритму MULTI — зменшити кількість моделей, що розглядаються в кожному ряді без втрати кращої комбінації змінних. На кожному рівні складності відбирається фіксована кількість кращих поєднань змінних моделі, а потім кращі поєднання комбінуються зі всіма іншими змінними по черзі при переході на наступний рівень. Алгоритм MIA реалізує ідею зменшення кількості моделей, які розглядаються в кожному ряді зі зменшенням кількості рядів, що дозволяє прискорити забезпечення оптимального рівня складності. На кожному ряді відбирається фіксована кількість кращих моделей, а потім кожна пара цих кращих моделей породжує нову змінну при переході на наступний рівень. Кількість кращих моделей та функцію перетворювання необхідно задавати апріорі. Попри високу продуктивність цей алгоритм здатен пропускати оптимальні рішення та зі збільшенням кількості рядів характеризується різким ускладненням моделі, тоді як значення зовнішнього критерію якості при цьому зменшується несуттєво.

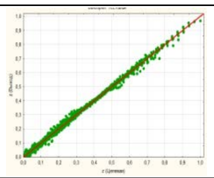
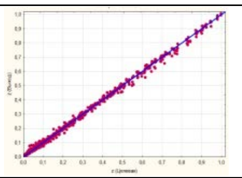
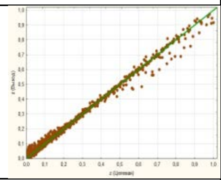
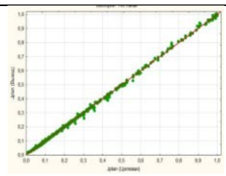
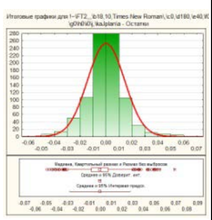
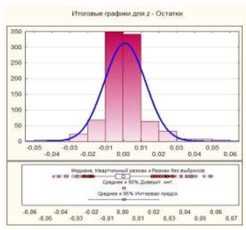
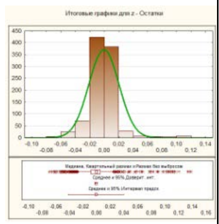
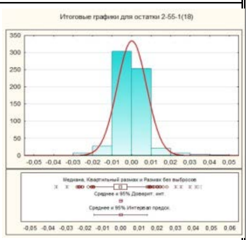
Серед основних переваг алгоритму МГУА [33], [34] можна виділити те, що за його допомогою для коротких, неточних або зашумлених даних може бути знайдена оптимальна нефізична модель. При цьому точність і структура такої моделі є прийнятними для подальшого застосування. Принциповим недоліком таких параметричних алгоритмів МГУА є необхідність оцінювання параметрів підсумкової моделі, які можуть бути зміщеними; додаткові затрати часу на пошук ефективного виду моделі.

Також для задач нелінійної регресії використовується потужна і універсальна модель машинного навчання — так званий метод опорних векторів SVM (support vector machine) [35]. Цей метод передбачає створення набору гіперплощин в багатовимірному або нескінченному просторі, які використовуються для розв’язання задач регресії. Алгоритм SVM спочатку розроблявся для лінійної і нелінійної класифікації. Частіше за все використовується модель із застосуванням класу SVR з бібліотеки Scikit-Learn, яка підтримує ядровий трюк (kernel trick) і дозволяє керувати балансом між шириною смуги поміж класами та обмеженням кількості порушень зазору, використовуючи гіперпараметр C. Ядровий трюк передбачає додавання додаткових поліноміальних ознак до набору даних, що робить можливим реалізацію нелінійної класифікації в результаті переходу до нового простору ознак. На практиці використовуються поліноміальні і гаусівські ядра. Безпосередньо для задач регресії використовується параметрично редукована (kernelized) модель SVM. Під час розв'язку задач регресії SVM-методом застосовується ефективний математичний прийом. Його ідея полягає в інвертуванні мети: замість спроби пристосуватися до найширшої з можливих смуг між класами, одночасно обмежуючи порушення зазору, регресія SVM намагається помістити якомога більше зразків даних на смузі разом з обмеженням порушення зазору (тобто зразків поза смугою). Ширина смуги керується гіперпараметром ε. Розповсюджений підхід з пошуку доцільних значень гіперпараметрів полягає у використанні пошуку на гратці. Метод SVM найкраще підходить для невеликого і середнього наборів даних. На великих навчальних вибірках цей метод апроксимації характеризується великими обчислювальними затратами.

Результати певного досвіду створення нейромережевих метамоделей, отриманого авторами, подано в табл. 1 та 2. Вибіркові показники адекватності метамоделей, які створені на основі одиночних нейронних мереж [36], [37], наведено табл. 1, а в табл. 2 — результати з використанням адитивного методу їх побудови [27].

Таблиця 1

Вибіркові статистичні показники адекватності метамоделей для поверхні відгуку $z = f(x, y)$

Показники якості метамоделей	RBF-ANN метамоделі			MLP-ANN метамодель
	поверхня відгуку 1	поверхня відгуку 2	поверхня відгуку 3	поверхня відгуку 4
коефіцієнт детермінації, R^2	0,996	0,998	0,992	0,999
середня похибка апроксимації, MAPE, %	9,06	11,86	11,26	3,93
відношення стандартних відхилень, S.D.ratio	0,0447	0,0331	0,0724	0,0199
діаграма розсіювання				
гістограма залишків				

Таблиця 2

Результати побудови RBF- метамоделей адитивним методом із прийняттям рішення усередненням по ансамблю для поверхні відгуку $z = f(x, y, w)$

Область декомпозиції, мм	Структура нейромережевих метамоделей	MAPE, %		MS_R		SS_R	
		навчальна вибірка	вибірка відтворення	навчальна вибірка	вибірка відтворення	навчальна вибірка	вибірка відтворення
$2 \le w < 6$	RBF-3-297-1(4); RBF-3-298-1(9); RBF-3-299-1(12); RBF-3-306-1(48)	5,38	6,76	0,000038	0,00029	0,0394	0,597
$6 \le w < 11$	RBF-3-326-1(3); RBF-3-329-1(20); RBF-3-326-1(42); RBF-3-332-1(80)	4,48	4,8	0,0000894	0,000146	0,116	0,378

Продовження табл. 2

Область декомпозиції, мм	Структура нейромережевих метамоделей	MAPE, %		MS_R		SS_R	
		навчальна вибірка	вибірка відтворення	навчальна вибірка	вибірка відтворення	навчальна вибірка	вибірка відтворення
$11 \le w \le 15$	RBF-3-297-1(1); RBF-3-301-1(22); RBF-3-309-1(63)	3,56	4,78	0,000136	0,000379	0,142	0,782

Висновки

Здійснений аналіз методів створення метамоделей і врахування переваг та недоліків, притаманних їм, дає змогу зробити висновок, що застосування RBF- та MLP-нейромереж є найдоцільнішим і перспективнішим для розв'язання багатовимірних апроксимаційних задач з метою побудови сурогатних моделей. Особливо це є актуальним щодо метамоделей для складних гіперповерхонь відгуку, які характеризуються суттєвою нелінійністю та нерегулярною поведінкою, внаслідок наявності у НМ узагальнюючої здатності, якостей універсальних апроксиматорів, забезпечення достатньо високої точності відтворення вхідних даних, стійкої роботи в умовах зашумлених даних, можливості врахування та об'єднання в єдине рішення декількох нейромереж. Евристичні сурогатні моделі на основі штучного інтелекту не потребують використання значних обчислювальних ресурсів та успішно виконують функції моделі-замісника. Для гіперповерхонь відгуку складної топології має сенс вживання технології декомпозиції областей пошуку та технік асоціативних машин. А рішення з вибору остаточної архітектури НМ може бути прийнято тільки після повного циклу навчання різноманітних варіантів їх структур та оцінки адекватності й інформативності отриманих метамоделей за сукупністю статистичних показників.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

[1] A. I. J. Forrester, A. Sóbester, and A. J. Keane, *Engineering design via surrogate modelling: a practical guide*. Chichester: Wiley, 2008.

[2] Е. В. Бурнаев, и П. В. Приходько, «Методология построения суррогатных моделей для аппроксимации пространственно неоднородных функций,» *Труды МФТИ*, т. 5, № 4, с. 122-132, 2013.

[3] А. О. Глебов, С. В. Карпов, и С. В. Карпушкин, «Методика оптимизации режимных и конструктивных характеристик нагревательной плиты вулканизационного пресса,» *Вестник Тамб. гос. Техн*, т. 19, № 1, с. 137-151, 2013.

[4] М. А. Чубань, «Аппроксимация поверхности отклика для использования в процессе параметрического синтеза машиностроительных конструкций,» *Вестник Нац. техн. ун-та "ХПИ" , сб. науч. тр. Темат. вып.: Транспортное машиностроение. Харьков : НТУ "ХПИ"*, т. 43, № 1152, с. 161-164, 2015.

[5] Е. В. Бурнаев, П. Ерофеев, А. Зайцев, Д. Кононенко, и Е. Капушев, «Суррогатное моделирование и оптимизация профиля крыла самолета на основе гауссовских процессов.» [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://itas2012.iitp.ru/pdf/1569602325.pdf. Дата обращения: Ноябрь 04, 2015.

[6] M. R. Garifullin, A. V. Barabash, E. A. Naumova, O. V. Zhuvak, T. Jokinen, and M. Heinisuo, "Surrogate modeling for initial rotational stiffness of welded tubular joints," *Magazine of Civil Engineering*, no. 3, pp. 53-76, 2016. https://doi.org/10.5862/MCE.63.4.

[7] S. Koziel, D. Echeverrı´a-Ciaurri, and L. Leifsson, "Surrogate-based methods," in *Computational Optimization Methods and Algorithms*. Berlin: Springer-Verlag, 2011, pp. 33-59.

[8] С. Г. Радченко, «Анализ методов моделирования сложных систем,» *Математичні машини і системи*, № 4, с. 123-127, 2015.

[9] J. Friedman, "Multivariate adaptive regression splines (with discussion)," *Annals of Statistics*, no. 19, pp. 1-141, 1991.

[10] В. Р. Целых, «Многомерные адаптивные регрессионные сплайны,» *Машинное обучение и анализ данных*, т. 3, № 1, с. 272-278, 2012.

[11] М. Г. Беляев, «Аппроксимация многомерных зависимостей по структурированным выборкам,» *Искусственный интеллект и принятие решений*, № 3. с. 24-39, 2013.

[12] David J. C. MacKay, *Information Theory, Inference and Learning Algorithms*. Cambridge: Cambridge University Press. 2003.

[13] S. Bilicz, M. Lambert, S. Gyimothy, and J. Pavo, "Solution of inverse problems in nondestructive testing by a kriging-based surrogate model," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 48, no. 2, 2012. https://doi.org/10.1109/TMAG.2011.2172196.

[14] Е. В. Бурнаев, М. Панов, Д. Кононенко, и И. Коноваленко, «Сравнительный анализ процедур оптимизации на основе гауссовских процессов.» [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://itas2012.iitp.ru/pdf/1569602385.pdf. Дата обращения: Ноябрь 04, 2015.

[15] Е. В. Бурнаев, М. Е. Панов, и А. А. Зайцев, «Регрессия на основе нестационарных гауссовских процессов с байесовской регуляризацией,» *Информационные процессы*. т. 15, № 3, с. 298-313, 2015.

[16] Е. В. Бурнаев, П. Д. Ерофеев, и П. В. Приходько, «Выделение главных направлений в задаче аппроксимации на основе гауссовских процессов,» *Труды МФТИ*, т. 5, № 3, с. 24-35, 2013.

[17] H. Fang, and M. F. Horstemeyer, "Global response approximation with radial basis functions," *Engineering optimization*, vol. 38, no. 4, pp. 407–424. 2006. https://doi.org/10.1080/03052150500422294.

[18] S. De Marchi, and E. Perracchiono, *Lectures on Radial Basis Functions*. Preprint, 2018.

[19] Саймон Хайкин, *Нейронные сети: полный курс*. (2-е изд.) Москва, РФ: Издательский дом «Вильямс», 2006.

[20] П. В. Афонин, «Система оптимизации на основе имитационного моделирования, генетического алгоритма и нейросетевых метамоделей,» на *Межд. конф. Knowledge-Dialogue-Solutions*, Varna, 2007, с. 60-63.

[21] П. В. Афонин, «Оптимизация моделей сложных систем на основе метаэвристических алгоритмов и нейронных сетей,» *Инженерный вестник: электронный научно-технический журнал*, т. 11, с. 508–516, 2016.

[22] A. Géron, *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow*. O'Reilly Media, 2019.

[23] N. Duffy, and D. P. Helmbold, “Boosting Methods for Regression,” *Machine Learning*. vol. 47, pp. 153-200, 2002. https://doi.org/10.1023/A:1013685603443.

[24] В. П. Боровиков, *Нейронные сети. STATISTICA Neural Networks: Методология и технологии современного анализа данных*. М., РФ: Горячая Линия-Телеком, 2008.

[25] W. Beyer, M. Liebscher, M. Beer, et al. *Neural Network Based Response Surface. Methods – a Comparative Study*. LS-DYNA Anwenderforum: Ulm. 2006.

[26] С. В. Ковалевский, и В. Б. Гитис, «Аппроксимация функций с помощью каскадных нейроподобных сетей,» *Штучний інтелект*, № 4. с. 589-593, 2008.

[27] V. Ya. Halchenko, R. V. Trembovetska, V. V. Tychkov, and A. V. Storchak, “Nonlinear surrogate synthesis of the surface circular eddy current probes,” *Przegląd elektrotechniczny*, vol. 9, pp. 76-82, 2019. https://doi.org/10.15199/48.2019.09.15.

[28] R. V. Trembovetska, V. Ya. Halchenko, and V. V. Tychkov, “Multiparameter hybrid neural network metamodel of eddy current probes with volumetric structure of excitation system,” *International Scientific Journal «Mathematical Modeling»*, vol. 3, no. 4, pp. 113-116, 2019. [Electronic resource]. Available: https://stumejournals.com/journals/mm/2019/4/113.

[29] V. Ya. Halchenko, R. V. Trembovetska, and V. V. Tychkov, “Development of excitation structure RBF-metamodels of moving concentric eddy current probe,” *Electrical engineering & electromechanics*, no. 2, pp. 28-38, 2019. https://doi.org/10.20998/2074-272X.2019.2.05.

[30] Х. Бринк, Дж. Ричардс, и М. Феверолф, *Машинное обучение*. Спб., РФ: Питер, 2017.

[31] А. Г. Ивахненко, *Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем*. Киев: Наук. Думка. 1982.

[32] A. G. Ivakhnenko, and G. A. Ivakhnenko, “The Review of Problems Solvable by Algorithms of the Group Method of Data Handling (GMDH),” *International Journal of Pattern Recognition and Image Analysis: Advanced in Mathematical Theory and Application*, vol. 5, no. 4, pp. 527-535, 1995.

[33] *GMDH – General description of the GMDH.* [Electronic resource]. Available: http://www.gmdh.net/GMDH_abo.htm . 2014.

[34] *GMDH – Spectrum of the GMDH algorithms.* [Electronic resource]. Available: http://www.gmdh.net/GMDH_alg.htm . 2014.

[35] F. Parrella, “Online support vector regression.” Thesis Inf. Sci, Dept. of Inf. Sci. Univ. of Genoa, Italy, 2007.

[36] В. Я. Гальченко, Р. В. Трембовецька, і В. В. Тичков, «Застосування нейрокомп’ютинга на етапі побудови метамоделей в процесі оптимального сурогатного синтезу антен,» *Вісник НТУУ «КПІ», серія :Радіотехніка. Радіоапаратобудування*, № 74, с. 60-72, 2018. https://doi.org/10.20535/RADAP.2018.74.60-72.

[37] Р. В. Трембовецька, В. Я. Гальченко, і В. В. Тичков, «Побудова MLP-метамоделі накладного вихрострумового перетворювача для задач сурогатного оптимального синтезу,» *Технічні вісті*, № 1 (47), № 2 (48), с. 27-31, 2018. [Електронний ресурс]. Режим доступу: https://drive.google.com/file/d/1WlTMRuV9GsWCBvT3X0JiNWbkhHm1K0mi/view.

Рекомендована кафедрою автоматизації та інтелектуальних інформаційних технологій ВНТУ

Стаття надійшла до редакції 16.06.2020

Гальченко Володимир Якович — д-р техн. наук, професор, професор кафедри приладобудування, мехатроніки та комп’ютеризованих технологій;

Трембовецька Руслана Володимирівна — канд. техн. наук, доцент, доцент кафедри приладобудування, мехатроніки та комп’ютеризованих технологій;

Тичков Володимир Володимирович — канд. техн. наук, доцент, доцент кафедри приладобудування, мехатроніки та комп’ютеризованих технологій, e-mail: v.tychkov@chdtu.edu.ua ;

Сторчак Анатолій Вячеславович — аспірант кафедри приладобудування, мехатроніки та комп’ютеризованих технологій.

Черкаський державний технологічний університет, Черкаси

V. Ya. Halchenko[1]
R. V. Trembovetska[1]
V. V. Tychkov[1]
A. V. Storchak[1]

Methods for Creating Metamodels: State of the Question

[1]Cherkasy State Technological University

There has been performed the generalization of materials of modern research in the field of mathematical modeling using well-known methods for constructing metamodels, that is, surrogate models for resource-intensive tasks in terms of computational costs and time, determination of their advantages and disadvantages, and practical application features was perfomed. The classification was carried out on the basis of the method used to create metamodels. The complexity and feasibility of using various techniques in specific cases were evaluated. Particular attention was paid to the construction of metamodels for multidimensional response hypersurfaces complex in topology. The geometric, stochastic, and heuristic classes of used metamodels were critically considered. The concentrated attention was paid to polynomial and spline-metamodels as to representatives of the class of geometric metamodels. A brief description of the main ideas of their construction, the necessary mathematical apparatus of implementation, lists the disadvantages and advantages of correct practical use in numerical experiments. Similarly, stochastic surrogate models, to which it is advisable to attribute regression models based on Gaussian processes or kriging models and models based on radial basis functions, were considered. In addition, a class of heuristic metamodels, which includes models on artificial neural networks, models using the method of group accounting of arguments and support-vector machines, was considered. Regression models based on radial basis neural networks and multilayer perceptrons were analyzed. The results of theoretical studies on surrogate models using multiple neural networks, that is, associative machines, were generalized and systematized. The features of constructing such machines of a static structure with various methods for obtaining collective coordinated composite of solution networks, in particular, with ensemble averaging and boosting, were given. The effectiveness of increasing the accuracy of approximation capabilities of metamodels using hybrid techniques for the simultaneous use of neural network technologies and additive regression, decomposition of the search area, was noted. According to the results of studies, it was found that for response hypersurfaces of complex topology in order to increase the accuracy of approximation, it makes sense to use a hybrid approach, which consists of the simultaneous application of decomposition technologies of the search area and neural networks built on the techniques of associative machines with various methods for obtaining solutions.

Keywords: response hypersurface, approximation, resource intensity, metamodel, geometric metamodels, stochastic metamodels, heuristic metamodels, neural networks, additive regression, associative machines.

Halchenko Volodymyr Ya. — Dr. Sc. (Eng.), Professor, Professor of the Chair of Instrumentation, Mechatronics and Computer Technologies, membership of Ukrainian Society for Non-Destructive Testing and Technical Diagnostics;

Trembovetska Ruslana V. — Cand. Sc. (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Chair of Instrumentation, Mechatronics and Computer Technologies, membership of Ukrainian Society for Non-Destructive Testing and Technical Diagnostics;

Tychkov Volodymyr V. — Cand. Sc. (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Chair of Instrumentation, Mechatronics and Computer Technologies, member of Ukrainian Society for Non-Destructive Testing and Technical Diagnostics, e-mail: v.tychkov@chdtu.edu.ua ;

Storchak Anatolii V. — Post-Graduate Student the Chair of Instrumentation, Mechatronics and Computer Technologies

В. Я. Гальченко[1]
Р. В. Трембовецкая[1]
В. В. Тычков[1]
А. В. Сторчак[1]

Методы создания метамоделей: состояние вопроса

Черкасский государственный технологический университет

Проведено обобщение материалов современных исследований в области математического моделирования с использованием известных методов построения метамоделей, т. е. суррогатных моделей, для ресурсоемких в смысле вычислительных затрат и времени задач, определение их преимуществ и недостатков, особенностей применения на практике. Проведена классификация по признаку применяемого метода создания метамоделей, оценивались трудоемкость и целесообразность использования различных техник. Особое внимание уделялось *построению метамоделей для многомерных сложных по топологии гиперповерхностей отклика. Критически рассматривались геометрические, стохастические, и эвристические классы применяемых метамоделей. Как представителям класса геометрических метамоделей сконцентрированное внимание уделялось полиномиальным и сплайн — метамоделям. Приведено краткое описание основных идей их построения, необходимый математический аппарат реализации, перечислены недостатки и преимущества корректного практического использования в численных экспериментах. Аналогичным образом рассматривались стохастические суррогатные модели, к которым целесообразно отнести регрессионные модели на основе гауссовских процессов или кригинг-модели и модели на радиально-базисных функциях. Также рассмотрен класс эвристических метамоделей, в состав которого входят модели на искусственных нейронных сетях, модели с использованием метода группового учета аргументов и машин опорных векторов. Проанализированы регрессионные модели на основе радиально-базисных нейронных сетей и многослойных персептронов. Обобщены и систематизированы результаты теоретических исследований по суррогатным моделям с использованием множественных нейронных сетей, т.е. ассоциативных машин. Приведены особенности построения этих машин статической структуры с различными методами получения коллективного согласованного для композита сетей решения, в частности, с усреднением по ансамблю и усилением. Отмечена эффективность повышения точности аппроксимационных возможностей метамоделей с помощью гибридных техник одновременного использования технологий нейронных сетей и аддитивной регрессии, декомпозиции области поиска. Показано, что для гиперповерхностей отклика сложной топологии с целью повышения точности аппроксимации имеет смысл использование гибридного подхода, заключающегося в одновременном применении технологий декомпозиции области поиска и нейронных сетей, построенных на техниках ассоциативных машин с различными методами получения решения.*

Ключевые слова: гиперповерхность отклика, аппроксимация, ресурсоемкость, метамодель, геометрические метамодели, стохастические метамодели, эвристические метамодели, нейронные сети, аддитивная регрессия, ассоциативные машины.

Гальченко Владимир Яковлевич — д-р техн. наук, профессор, профессор кафедры приборостроения, мехатроники и компьютеризированных технологий;

***Трембовецкая Руслана Владимировна* —** канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры приборостроения, мехатроники и компьютеризированных технологий;

***Тычков Владимир Владимирович* —** канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры приборостроения, мехатроники и компьютеризированных технологий, e-mail: v.tychkov@chdtu.edu.ua ;

***Сторчак Анатолий Вячеславович* —** аспирант кафедры приборостроения, мехатроники и компьютеризированных технологий