5. Принятие решения об адекватности модели

На этапе оптимизации параметров реализуется выбор «наилучшей» (в силу некоторого критерия) модели в пределах фиксированной модельной структуры. В соответствии с процедурой идентификации (рис. 2.1) следующим шагом является принятие решения об адекватности (неадекватности), или подтверждение модели. Основной задачей на данном этапе является получение ответа на вопрос: «насколько хороша» оптимизированная модель. Несмотря на неформальный характер поставленного вопроса, можно выделить ряд аспектов, исследование которых позволяет сделать выводы о возможности практического применения модели, т.е. подтвердить модель:

- согласованность модели с экспериментальными данными;
- возможность использования модели для решения поставленной задачи;
- адекватность модели реальной системе.

В общем случае для подтверждения модели необходимо сопоставить с полученной моделью всю имеющуюся информацию о реальной системе [9], т.е. априорную информацию, экспериментальные данные и опыт использования модели. В прикладных задачах идентификации систем типа черный ящик наиболее естественным (а зачастую, единственно возможным) объектом для сопоставления с моделью являются экспериментальные данные.

Наиболее простой и естественный способ подтверждения работоспособности модели – проверка на множестве данных, не использованных при оптимизации параметров модельной структуры. Этот подход, известный как перекрестная оценка [9], требует специального набора данных – «тестового множества», удовлетворяющего тем же требованиям, что и обучающее множество (например, покрытие всего рабочего диапазона системы). Практическая реализация подхода не вызывает затруднений, так как сводится к оценке моделирования работы сети в режиме нормального функционирования. Единственной проблемой может оказаться невозможность выделения тестового множества в силу недостатка экспериментальных данных.

В настоящем параграфе рассматриваются следующие методы подтверждения модели, возможность реализации которых не зависит от размера множества экспериментальных данных:

- оценка модели с позиции невязок: исследование корреляционных функций различных комбинаций невязок и данных;
- имитационное моделирование – прогнозирование на k шагов вперед;
- оценка средней ошибки обобщения: используется для выявления возможности использования модели в качестве прогнозирующей для проведения структурной оптимизации нейросетевых моделей.

5.1. Исследование корреляционных функций

Если предположить, что некоторая модель $M(\hat{\theta})$ получена путем оптимизации на основе множества экспериментальных данных Z^N, можно получить оценку адекватности модели путем анализа ошибок прогнозирования (невязок). Источником данных предполагается уравнение типа

$$y(t) = g(\varphi(t,\hat{\theta}),\hat{\theta}) + e(t), \qquad (2.149)$$

где $e(t)$ – белый шум, $g(\varphi(t,\theta),\theta) = \hat{y}(t|\theta)$ – отображение, реализуемое моделью.

По отношению к данным, вопрос о подтверждении модели равносилен вопросу о правдоподобии того факта, что реализация Z^N действительно может быть порождена соотношением (2.149). Это эквивалентно утверждению, что ошибки прогнозирования (невязки)

$$\varepsilon(t,\hat{\theta}) = y(t) - g(\varphi(t,\hat{\theta}),\hat{\theta}) = y(t) - \hat{y}(t|\hat{\theta}) \qquad (2.150)$$

являются последовательностью нормально распределенных независимых случайных величин. Проверку выполнения условия (2.150) можно провести статистическими методами различной сложности [25].

Можно утверждать, что модель вполне адекватна и информация, содержащаяся в обучающем множестве, была извлечена полностью в том случае, если ошибка прогнозирования некоррелирована с предыдущими данными [9,25]. В принципе, можно рассматривать корреляцию со всеми возможными линейными и нелинейными комбинациями данных, хотя на практике это нереалистично. Поэтому для оценки обычно используются лишь несколько наиболее репрезентативных авто- и взаимокорреляционных функций [28]:

$$\widehat{r}_{\varepsilon\varepsilon}(\tau) = \frac{\sum_{t=1}^{N-\tau}(\varepsilon(t,\widehat{\theta}) - \overline{\varepsilon})(\varepsilon(t-\tau,\widehat{\theta}) - \overline{\varepsilon})}{\sum_{t=1}^{N}(\varepsilon(t,\widehat{\theta}) - \overline{\varepsilon})^2} = \begin{cases} 1, & \tau = 0, \\ 0, & \tau \neq 0; \end{cases} \qquad (2.151)$$

$$\widehat{r}_{u\varepsilon}(\tau)=\frac{\sum_{t=1}^{N-\tau}(u(t)-\overline{u})(\varepsilon(t-\tau,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})}{\left(\sum_{t=1}^{N}(u(t)-\overline{u})^2\right)^{1/2}\left(\sum_{t=1}^{N}(\varepsilon(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})^2\right)^{1/2}}=0,\ \forall\tau; \qquad (2.152)$$

$$\widehat{r}_{u^2\varepsilon^2}(\tau)=\frac{\sum_{t=1}^{N-\tau}(u^2(t)-\overline{u}^2)(\varepsilon^2(t-\tau,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon}^2)}{\left(\sum_{t=1}^{N}(u^2(t)-\overline{u}^2)^2\right)^{1/2}\left(\sum_{t=1}^{N}(\varepsilon^2(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon}^2)^2\right)^{1/2}}=0,\ \forall\tau; \qquad (2.153)$$

$$\widehat{r}_{u^2\varepsilon}(\tau)=\frac{\sum_{t=1}^{N-\tau}(u^2(t)-\overline{u}^2)(\varepsilon(t-\tau,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})}{\left(\sum_{t=1}^{N}(u^2(t)-\overline{u}^2)^2\right)^{1/2}\left(\sum_{t=1}^{N}(\varepsilon(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})^2\right)^{1/2}}=0,\ \forall\tau; \qquad (2.154)$$

$$\widehat{r}_{\varepsilon\beta}(\tau)=\frac{\sum_{t=1}^{N-\tau}(\varepsilon(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})(\beta(t-\tau-1)-\overline{\beta})}{\left(\sum_{t=1}^{N}(\varepsilon(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon})^2\right)^{1/2}\left(\sum_{t=1}^{N}(\beta(t)-\overline{\beta})^2\right)^{1/2}}=0,\ \tau\ge 0; \qquad (2.155)$$

где

$$\beta(t)=u(t)\varepsilon(t,\widehat{\theta}), \qquad (2.156)$$

чертой сверху обозначены средние значения сигналов

$$\overline{x}=\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}x(t). \qquad (2.157)$$

Обычно производится проверка функций на равенство нулю при 95% доверительном интервале при $\tau\in[-20,20]$, т.е. $-1{,}96/\sqrt{N}<\hat{r}<1{,}96/\sqrt{N}$.

Первые две корреляционные оценки (2.151) и (2.152) традиционно используются при реализации методов идентификации линейных систем, т.к. рассмотрение корреляционных функций более высокого порядка нецелесообразно.

В работе [28] также предлагается рассматривать следующие функции:

$$\widehat{r}_{\alpha\varepsilon^2}(\tau)=\frac{\sum\limits_{t=1}^{N-\tau}(\alpha(t)-\overline{\alpha})(\varepsilon^2(t-\tau,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon}^2)}{\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(\alpha(t)-\overline{\alpha})^2\right)^{1/2}\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(\varepsilon^2(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon}^2)^2\right)^{1/2}}=\begin{cases}k, & \tau=0,\\ 0, & \tau\neq 0;\end{cases} \quad (2.158)$$

$$\widehat{r}_{\alpha u^2}(\tau)=\frac{\sum\limits_{t=1}^{N-\tau}(\alpha(t)-\alpha)(u^2(t-\tau)-\overline{u}^2)}{\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(\alpha(t)-\overline{\alpha})^2\right)^{1/2}\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(u^2(t,\widehat{\theta})-\overline{u}^2)^2\right)^{1/2}}=0,\ \forall\tau, \quad (2.159)$$

где

$$\alpha(t)=y(t)\varepsilon(t,\widehat{\theta}), \quad (2.160)$$

$$k_2=\frac{\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(\varepsilon^2(t,\widehat{\theta})-\overline{\varepsilon}^2)\right)^{1/2}}{\left(\sum\limits_{t=1}^{N}(\alpha(t)-\overline{\alpha})^2\right)^{1/2}}. \quad (2.161)$$

Следует отметить, что представленные тесты могут применяться и к многомерным моделям. В этом случае исследуются корреляционные функции для каждой комбинации вход-выход.

5.2. k-шаговое прогнозирование

В случае, когда частота дискретизации достаточно высока по сравнению с динамикой реальной системы, анализ ошибок одношагового прогнозирования становится неэффективным. Действительно, для двух последующих значений выходного сигнала в большинстве случаев верно соотношение $y(t) \approx y(t-1)$, и значение ошибки прогнозирования невелико. Очевидно, что небольшие ошибки прогнозирования в этом случае не обусловливают адекватности модели. Одним из подходов к решению данной проблемы является оценка многошагового прогноза модели путем имитационного моделирования [9]. В этом случае регрессионный вектор состоит из фактических входных сигналов реальной системы и прогнозируемых на предшествующих итерациях выходных значений. При использовании NNARX модели k-шаговый прогноз определяется следующим соотношением:

$$\hat{y}(t+k) \equiv \hat{y}(t+k \mid t, \hat{\theta}) = \hat{g}(\overline{\varphi}(t+k), \hat{\theta}), \qquad (2.162)$$

где

$$\begin{aligned} \overline{\varphi}^{\mathrm{T}}(t+k) = \big[\, & \hat{y}(t+k), \ldots, \hat{y}(t+k-\min(k,n)+1), \\ & y(t), \ldots, y(t-\max(n-k,0)), u(t-d+k), \ldots, u(t-d-m+k) \big] \end{aligned} \qquad (2.163)$$

n – число предшествующих значений выходного сигнала, m – число предшествующих входов, d – временная задержка.

Результаты k-шагового прогнозирования можно оценивать визуально либо вводя некоторую формальную меру расстояния между сигналами.

5.3. Оценка средней ошибки обобщения

Достоверная оценка средней ошибки обобщения весьма существенна для решения задачи подтверждения модели. Кроме того, данная оценка может быть эффективно использована для быстрого анализа различных модельных структур с целью установления наиболее адекватной реальной системе. В настоящем разделе рассматривается оценка ошибки обобщения, основанная на ФОП Акайке [21].

В разделе 2.4.2 оценка средней ошибки прогнозирования была введена как

$$\widehat{V}_M = \frac{1}{2}\sigma_e^2\left(1+\frac{p}{N}\right) \tag{2.164}$$

при условии, что нейросетевая модель обучается до достижения точки минимума нерегуляризованного критерия (2.145). В работе [9] введена оценка дисперсии шумов в соответствии со следующим выражением:

$$\widehat{\sigma}_e^2 = 2\frac{N}{N-p}V_N(\widehat{\theta}, Z^N)\,. \tag{2.165}$$

Подстановка (2.165) в выражение (2.164) приводит к оценке типа

$$\widehat{V}_M = \frac{N+p}{N-p}V_N(\widehat{\theta}, Z^N)\,. \tag{2.166}$$

Для регуляризованного критерия ($D = \alpha I$) оценка принимает вид

$$\widehat{V}_M = \frac{1}{2}\left(\sigma_e^2\left(1+\frac{p_1}{N}\right)+\gamma\right), \tag{2.167}$$

где

$$p_1 = \mathrm{tr}\left[R(R+D)^{-1} R(R+D)^{-1} \right], \qquad (2.168)$$

$$\gamma = \frac{1}{N^2} \theta_0^{\mathrm{T}} D \left(R + \frac{1}{N} D \right)^{-1} R \left(R + \frac{1}{N} D \right)^{-1} D\theta_0 . \qquad (2.169)$$

При обучении нейросетевой модели в соответствии с регуляризованным критерием требуется определить оценку значения дисперсии шумов.

Проводя разложение критерия в окрестности действительных значений весовых коэффициентов сети θ_0, получим следующую оценку:

$$E\left\{ V_N(\hat{\theta}, Z^N) \right\} = E\left\{ V_N(\theta_0, Z^N) \right\} + E\left\{ (\hat{\theta} - \theta_0)^{\mathrm{T}} V_N'(\theta_0, Z^N) \right\} + \\ + \frac{1}{2} E\left\{ (\hat{\theta} - \theta_0)^{\mathrm{T}} V_N''(\theta_0, Z^N)(\hat{\theta} - \theta_0) \right\}. \qquad (2.170)$$

Очевидно, что первая составляющая в правой части выражения (2.170) равна половине дисперсии шумов:

$$E\left\{ V_N(\theta_0, Z^N) \right\} = \bar{V}(\theta_0) = \frac{1}{2} \sigma_e^2 . \qquad (2.171)$$

Определение второй составляющей несколько сложнее. Найдем разложение первого порядка критерия в окрестности θ_0:

$$0 = W_N'(\hat{\theta}, Z^N) \approx W_N'(\theta_0, Z^N) + (\hat{\theta} - \theta_0)^{\mathrm{T}} W_N''(\theta_0, Z^N), \qquad (2.172)$$

что приводит к соотношению

$$(\hat{\theta} - \theta_0) \approx -\left[W_N''(\theta_0, Z^N) \right]^{-1} W_N'(\theta_0, Z^N) . \qquad (2.173)$$

В работе [9] показано, что при достаточно больших значениях N

$$V_N''(\theta_0, Z^N) \approx \bar{R} = E\left\{ \psi(t, \theta_0) \psi^T(t, \theta_0) \right\}, \qquad (2.174)$$

что приводит к выражению

$$W_N''(\theta_0, Z^N) = V_N''(\theta_0, Z^N) + \frac{1}{N} D \approx \bar{R} + \frac{1}{N} D. \qquad (2.175)$$

Подстановка полученного результата в (2.170) дает следующее соотношение:

$$\begin{aligned}
&E\left\{(\hat{\theta} - \theta_0)^{\mathrm{T}} V_N'(\hat{\theta}, Z^N)\right\} \approx \\
&\approx E\left\{\left(-\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0) + \frac{1}{N}D\theta_0\right)^{\mathrm{T}}\left[\bar{R} + \frac{1}{N}D\right]^{-1} V_N'(\theta_0, Z^N)\right\} = \\
&= E\left\{\left(-\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)^{\mathrm{T}}\left[\bar{R} + \frac{1}{N}D\right]^{-1}\left(\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)\right\} + \\
&\quad + E\left\{\left(\frac{1}{N}\theta_0^{\mathrm{T}} D\right)\left[\bar{R} + \frac{1}{N}D\right]^{-1}\left(\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)\right\}.
\end{aligned} \qquad (2.176)$$

Шумы не зависят от входного сигнала и некоррелированы с функциями входного сигнала. Таким образом, вторая составляющая

$$E\left\{\left(\frac{1}{N}\theta_0^{\mathrm{T}} D\right)\left[\bar{R} + \frac{1}{N}D\right]^{-1}\left(\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)\right\}$$

в выражении (2.176) равна нулю. Введение оператора трассировки матриц позволяет переписать выражение (2.176) в следующем виде [9]:

$$\begin{aligned}
&E\left\{(\hat{\theta} - \theta_0)^{\mathrm{T}} V_N'(\hat{\theta}, Z^N)\right\} \approx \\
&\approx -\mathrm{tr}\left[E\left\{\left(\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)\left(\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\psi(t,\theta_0)e(t,\theta_0)\right)^{\mathrm{T}}\right\}\times\right. \\
&\left.\times\left[\bar{R} + \frac{1}{N}D\right]^{-1}\right] = -\mathrm{tr}\left[\frac{\sigma_e^2}{N}\bar{R}\left(\bar{R} + \frac{1}{N}D\right)^{-1}\right].
\end{aligned} \qquad (2.177)$$

Найдем значение третьего компонента правой части выражения (2.170):

$$\mathrm{tr}\left[E\left\{(\hat{\theta}-\theta_0)^{\mathrm{T}}\bar{R}(\hat{\theta}-\theta_0)\right\}\right]=\mathrm{tr}\left[\bar{R}E\left\{(\hat{\theta}-\theta_0)(\hat{\theta}-\theta_0)^{\mathrm{T}}\right\}\right]=\mathrm{tr}\left[\bar{R}P\right], \quad (2.178)$$

где матрица P, представляющая собой математическое ожидание девиаций весовых коэффициентов, трактуется как простое затухание весов. На основе соотношений (2.173) и (2.175) можно получить выражение для сложного затухания (имеются в виду различные значения параметров затухания для каждого весового коэффициента):

$$\begin{aligned} P &\equiv E\left\{(\hat{\theta}-\theta_0)(\hat{\theta}-\theta_0)^{\mathrm{T}}\right\}\approx \\ &\approx \frac{\sigma_e^2}{N}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}\bar{R}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}+ \\ &+\frac{1}{N^2}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}D\theta_0\theta_0^{\mathrm{T}}D\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}, \end{aligned} \quad (2.179)$$

что приводит к следующему выражению:

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\left[\bar{R}P\right] &= \frac{\sigma_e^2}{N}\bar{R}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}\bar{R}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}+ \\ &+\frac{1}{N^2}\theta_0^{\mathrm{T}}D\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}\bar{R}\left(\bar{R}+\frac{1}{N}D\right)^{-1}\theta_0 D. \end{aligned} \quad (2.180)$$

$\bar{R}$ – неизвестно, поэтому производится замена на гессиан Гаусса - Ньютона, определенный в точке минимума $R\equiv R(\hat{\theta})$. Выделяя в выражении (2.180) p_1 (2.186), γ (2.169) и подставляя (2.171), (2.177), (2.180) в (2.170), получаем следующий результат:

$$2E\left\{V_N(\hat{\theta},Z^N)\right\}\approx\sigma_e^2-2\frac{\sigma_e^2}{N}\mathrm{tr}\left(R\left(R+\frac{1}{N}D\right)^{-1}\right)+\frac{\sigma_e^2}{N}p_1+\gamma\,. \quad (2.181)$$

Определяя p_2 как

$$p_2 = \mathrm{tr}\left[R\left(R + \frac{1}{N} D \right)^{-1} \right], \tag{2.182}$$

можно переписать (2.181) в форме

$$2E\left\{ V_N(\widehat{\theta}, Z^N) \right\} \approx \sigma_e^2 \left(1 + \frac{p_1 - 2p_2}{N} \right) + \gamma, \tag{2.183}$$

что приводит к следующей оценке дисперсии шумов:

$$\widehat{\sigma}_e^2 = \frac{2NV_N(\widehat{\theta}, Z^N) - N\gamma}{N + p_1 - 2p_2}. \tag{2.184}$$

Для случая $D = \alpha I$

$$p_2 = \mathrm{tr}\left[R\left(R + \frac{\alpha}{N} I \right)^{-1} \right] = \sum_{i=1}^{p} \frac{\delta_i}{\delta_i + \alpha/N} \approx p_1. \tag{2.185}$$

Отбрасывая γ и подставляя оценку дисперсии в выражение (2.167), получаем следующую оценку ошибки прогнозирования:

$$\widehat{V}_M = \frac{N - p_1}{N + p_1 - 2p_2} V_N(\widehat{\theta}, Z^N) \ \left(\approx \frac{N + p_1}{N - p_1} V_N(\widehat{\theta}, Z^N) \right). \tag{2.186}$$

Выражение для средней ошибки обобщения получено с учетом того факта, что реальная система содержится в выбранной модельной структуре, т.е. $S \in M$. Однако практическое использование оценки достаточно эффективно даже в случае существенной ошибки смешения.