



LOMONOSOV MOSCOW  
STATE UNIVERSITY



# Новый тип вейвлет-нейронных сетей

**Ефиторов А. О., Доленко С.А.**  
НИИ ядерной физики имени Д. В. Скобельцына  
[a.efitorov@sinp.msu.ru](mailto:a.efitorov@sinp.msu.ru)

Москва, 2019г

# Основные публикации

- *Efitorov A., Dolenko S. A new type of a wavelet neural network // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). — 2018. — Vol. 27, no. 3. — P. 152–160.*
- *Efitorov A., Shiroky V., Dolenko S. A neural network of multiresolution wavelet analysis // Lecture Notes in Computer Science. — 2018. — Vol. 11140. — P. 567–574;*
- Use of wavelet neural networks to solve inverse problems in spectroscopy of multi-component solutions / A. Efitorov, S. Dolenko, T. Dolenko et al. // *Studies in Computational Intelligence*. — 2020. — Vol. 856. — P. 285–294

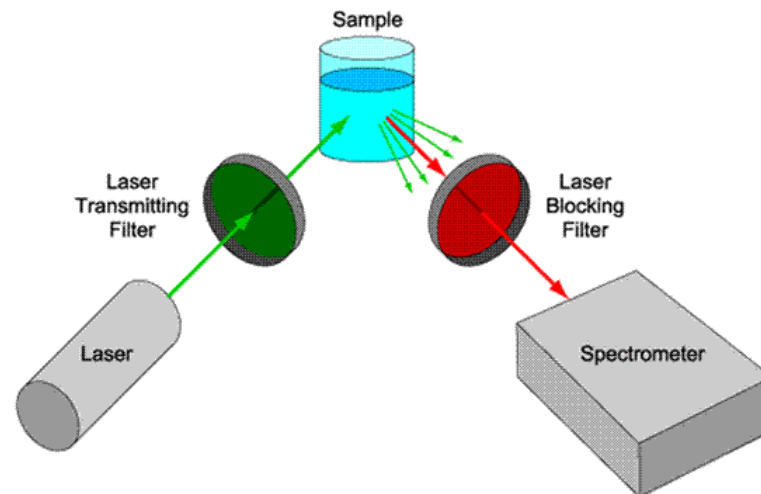
# Обратная задача спектроскопии

## Задача:

Определить концентрации 10 растворенных в воде ионов неорганических солей;

## Метод измерений:

Спектроскопия комбинационного рассеяния;



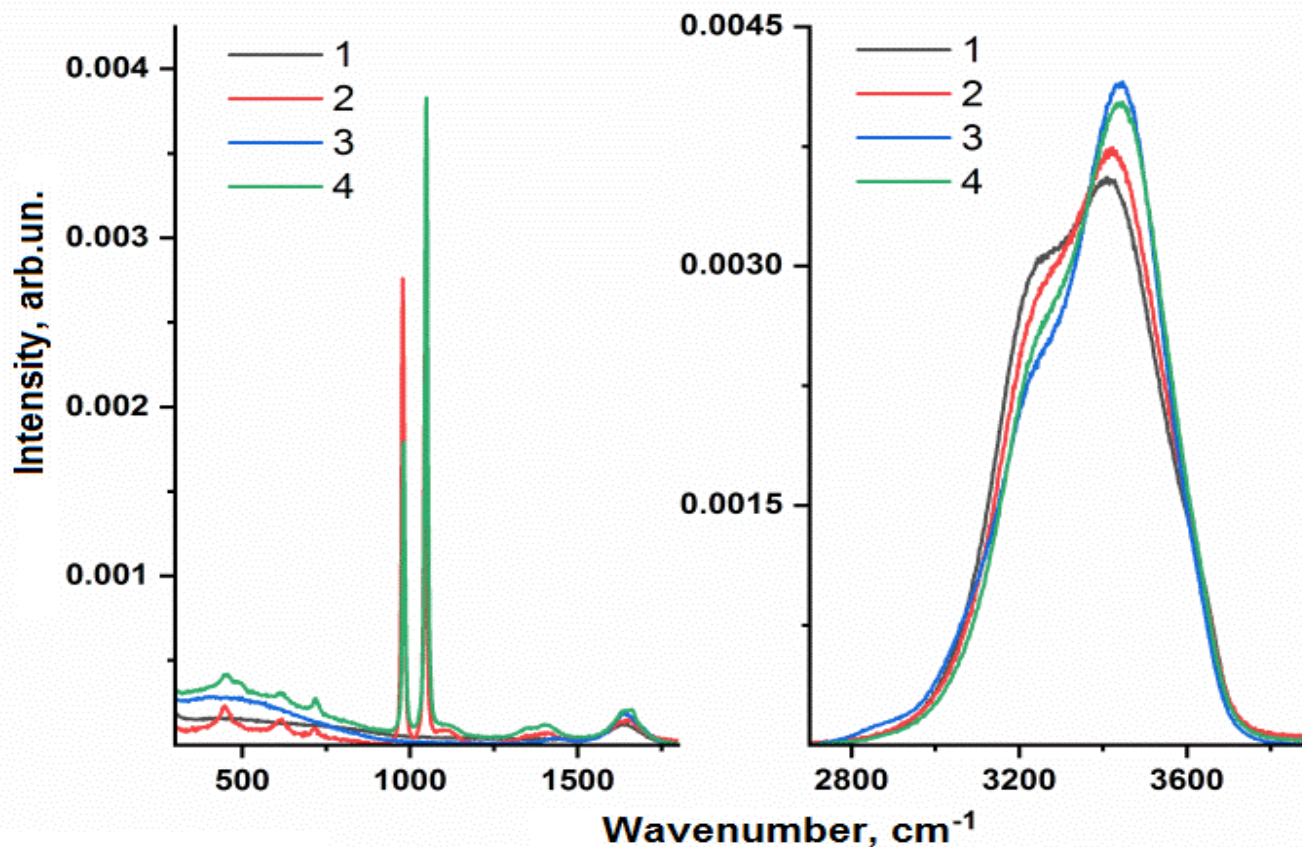
## Массив данных:

- ~4.5 тыс спектра реальных измерений;
- В водных растворах присутствуют от 1 до 5 солей одновременно + дистиллированная вода;
- Диапазон измерения концентраций: 0 - 4.5Моль/Л, шаг сетки: 0.2Моль/Л;
- Входные признаки: интенсивности каналов спектров, 2048 каналов;
- Тренировочный, валидационный, тестовый наборы в соотношении 70:20:10;

## Предобработка:

- Удаление горизонтального пьедестала;
- Нормировка на площадь валентной полосы воды;
- Шкалирование каналов по тренировочному массиву в интервал 0 – 1.

# КР-спектры неорганических солей



Сравнение спектров комбинационного рассеяния для низкочастотной области (слева) и валентной полосы воды (справа) для разных солей

1 – дистиллированная вода;

2 –  $\text{KNO}_3$  – 0.6M,  $\text{Li}_2\text{SO}_4$  – 0.75M;

3 –  $\text{NaCl}$ -0.5M,  $\text{NH}_4\text{Br}$  – 1.75M,  $\text{CsI}$  – 0.25M;

4 –  $\text{NaCl}$  – 0.2M,  $\text{NH}_4\text{Br}$  – 0.2M,  $\text{Li}_2\text{SO}_4$  – 0.4M,  $\text{KNO}_3$  – 1M,  $\text{CsI}$  – 0.6M.

# Универсальная аппроксимация (УА)

(Колмогоров, 1957)

Любая непрерывная функция  $n$  аргументов на единичном  $n$ -мерном кубе представима в виде суперпозиции непрерывных функций одного аргумента и операции сложения:

$$a(x^1, x^2, \dots, x^n) = \sum_{k=1}^{2n+1} h_k \left( \sum_{i=1}^n \varphi_{ik}(x^i) \right)$$

- УА на сигмоидальных функциях (Цыбенко, 1989)
- Нейронная сеть – универсальный аппроксиматор, независимо от выбора передаточной функции (Kurt Hornik, 1991)
- УА на вейвлет-функциях (Zhang, 1992)
- УА представлен нечеткой логической моделью (Zhang, 1992)

# Преимущества и недостатки вейвлет-нейронных сетей

## Недостатки:

- Проблемы работы с данными высокой размерности;
- Зависимость от инициализации начальных параметров;
- Проблема подбора параметров обучения для весов разных типов;

## Преимущества:

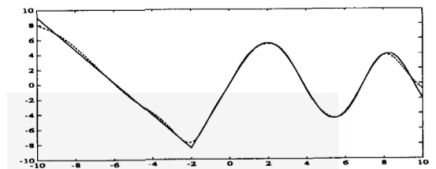
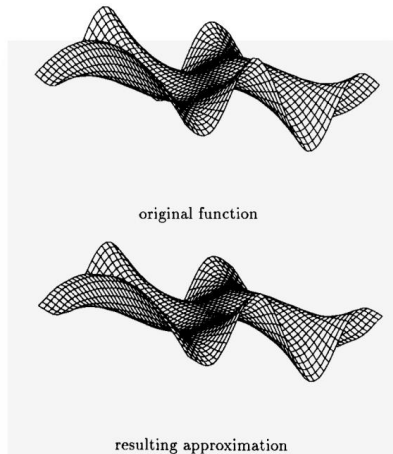
- Лучшая аппроксимация при меньшем числе параметров;
- Аппроксимация **негладкими функциями**;

TABLE I  
APPROXIMATION RESULTS OF  $f(\mathbf{x}) = (x_1^2 - x_2^2) \sin(0.5x_1)$

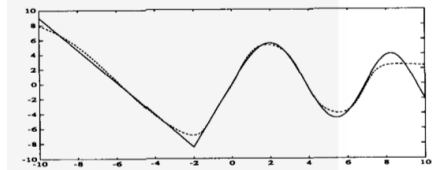
method	number of units	number of parameters	number of iterations	$\delta$
wavelet network	49	442	40000	0.03395
neural network	225	1126	40000	0.29381
wavelet decomposition	961	962	40000	0.14289

TABLE II  
APPROXIMATION RESULTS OF  $\eta = f(\pi, \omega)$

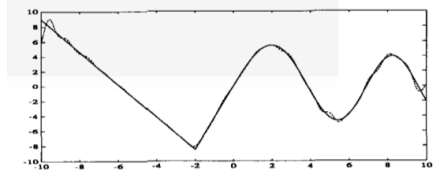
method	number of units	number of parameters	number of iterations	$\delta$
wavelet network	9	82	$10^5$	0.06041
neural network	16	81	$10^5$	0.09240
wavelet decomposition	81	82	$10^5$	0.08311



wavelet network, 7 wavelons, 22 parameters,  
10000 learning iterations,  $\delta = 0.05057$ .



neural network, 7 neurons, 22 parameters,  
10000 learning iterations,  $\delta = 0.13286$

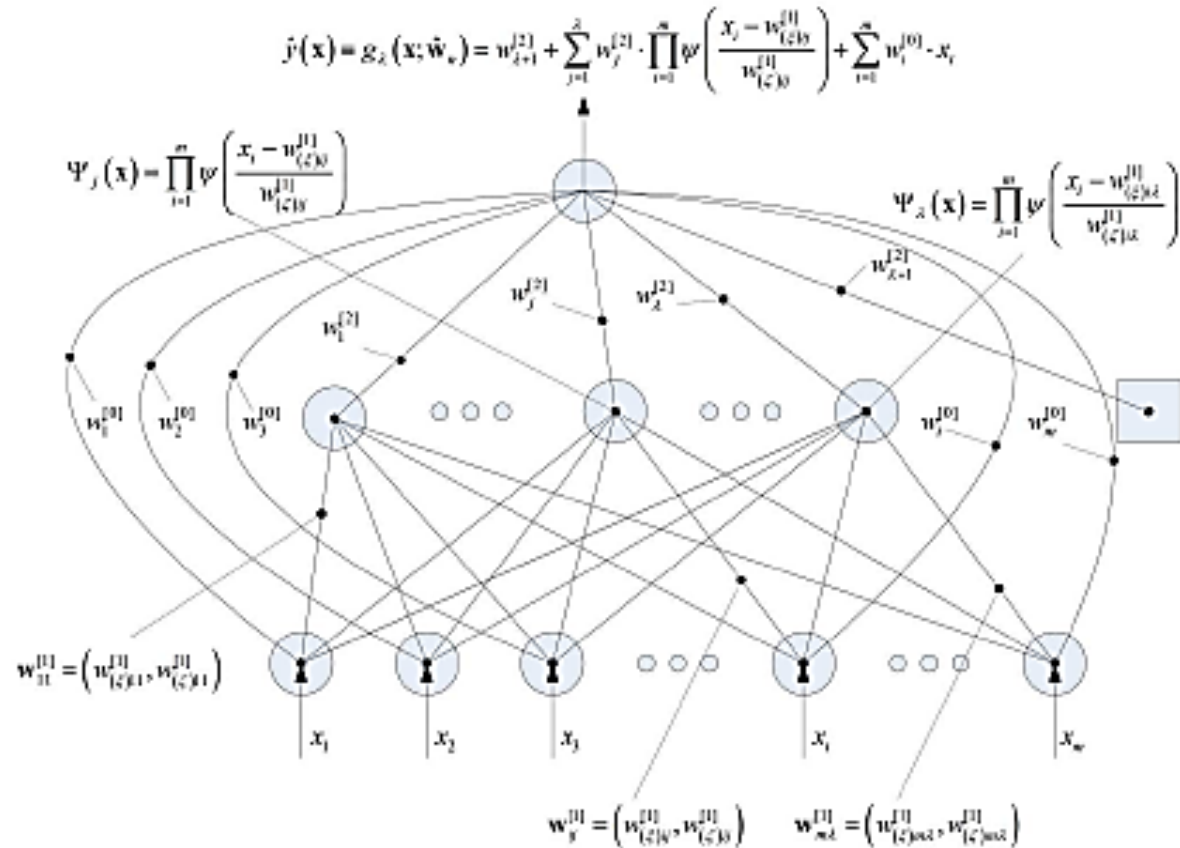


wavelet decomposition, 31 wavelons, 32 parameters,  
10000 learning iterations,  $\delta = 0.06350$



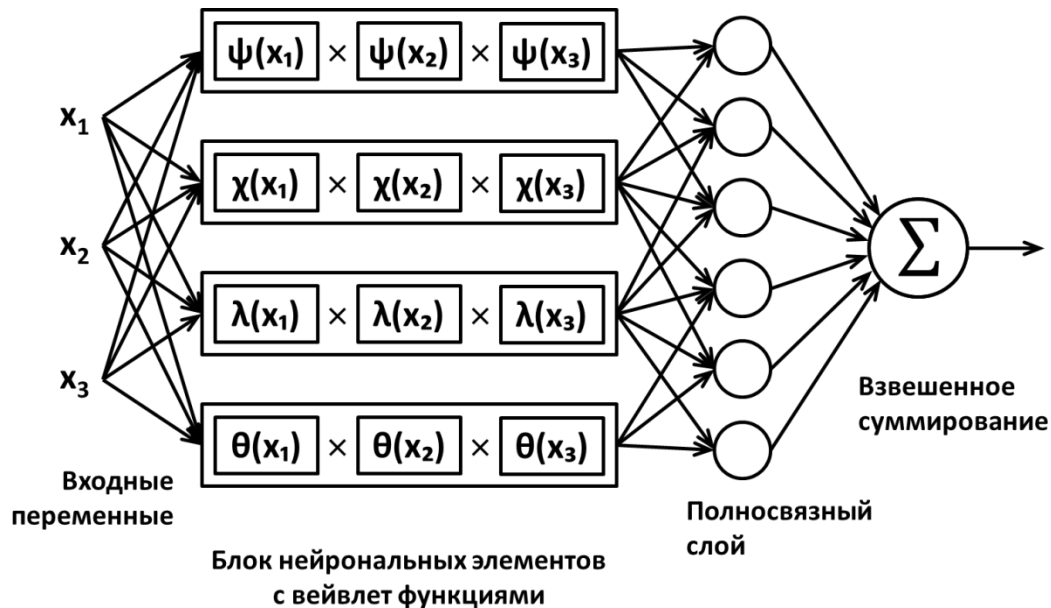
Fig. 5. Approximation of the function  $f(\mathbf{x}) = (x_1^2 - x_2^2) \sin(0.5x_1)$  by a wavelet network over  $\mathcal{D} = [-10, 10] \times [-10, 10]$ .

# Вейвлет-нейронные сети



Структура вейвлет-нейронной сети с обходными соединениями.

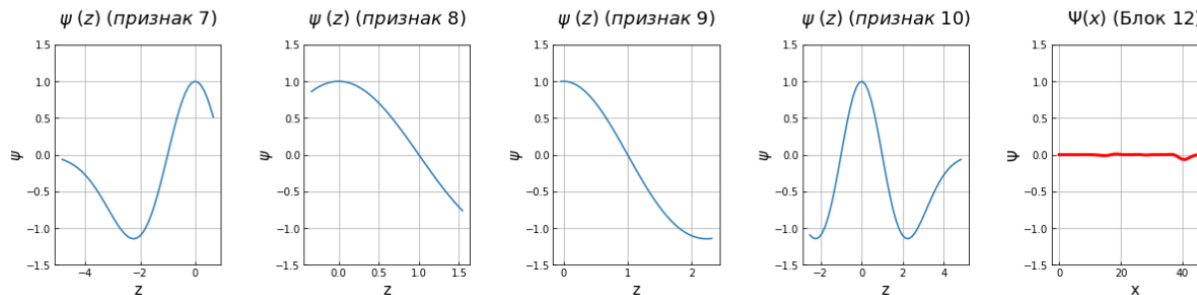
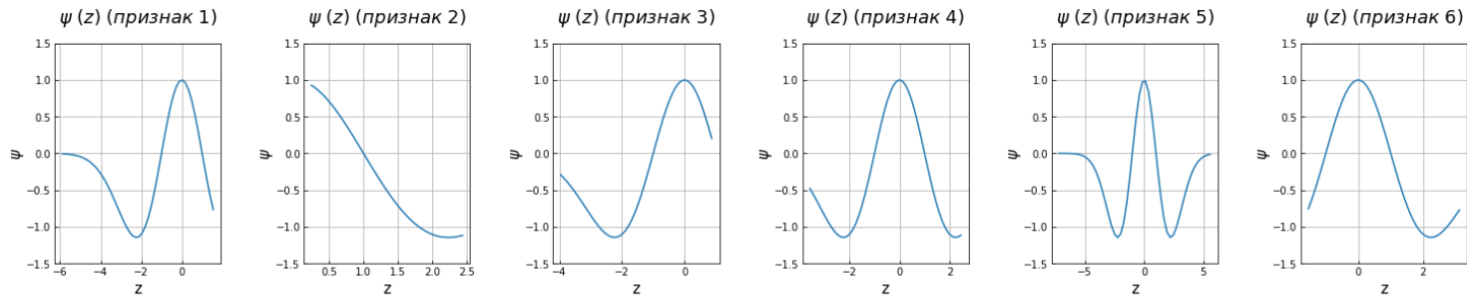
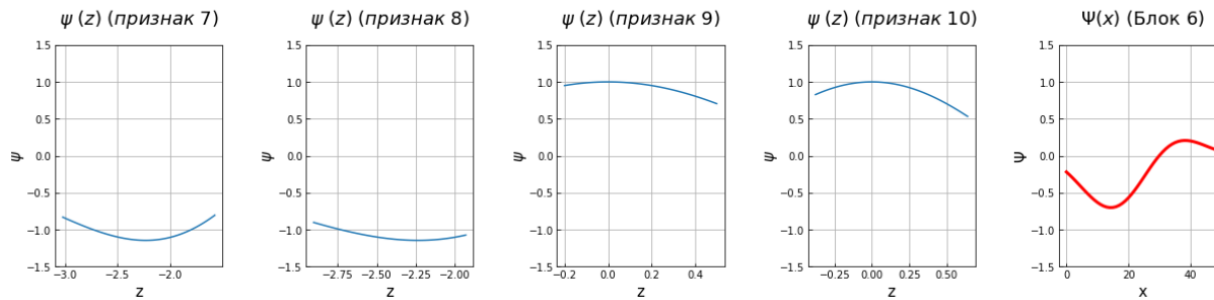
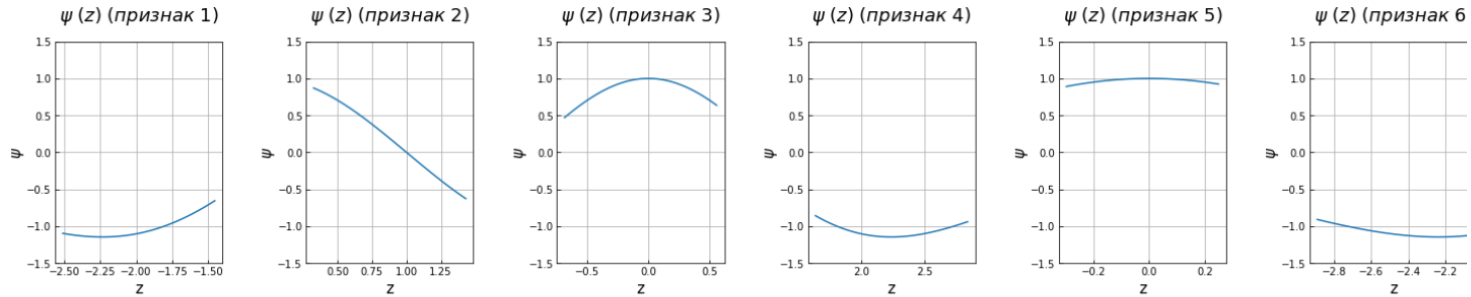
# Вейвлет нейронная-сеть



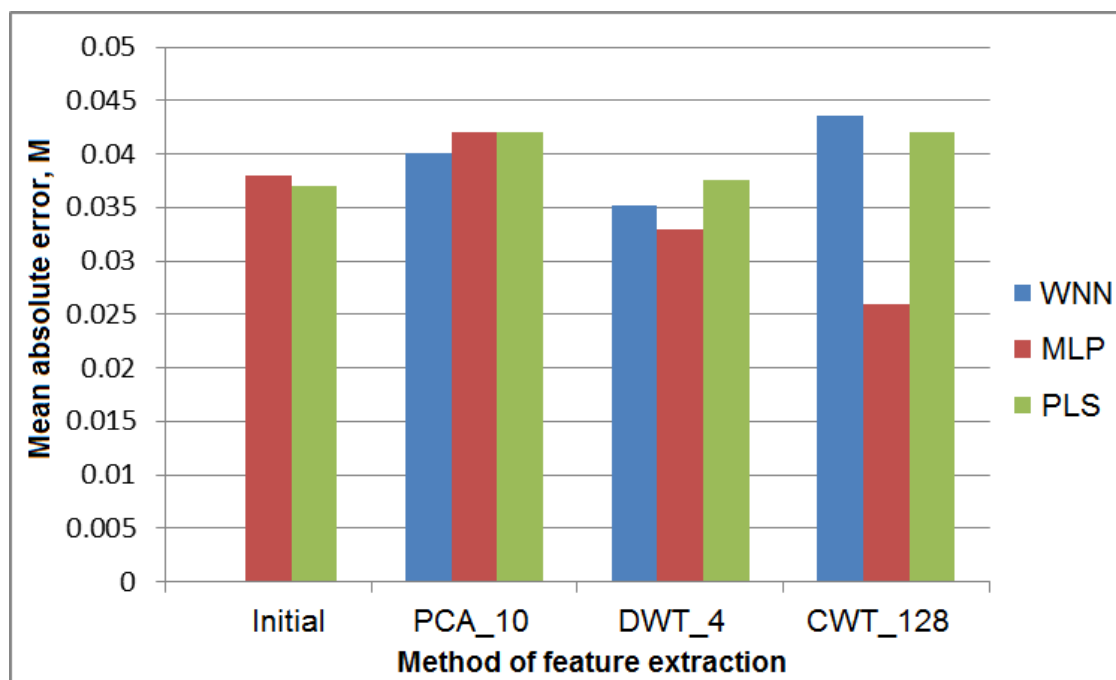
- Количество блоков нейрональных элементов задается произвольно;
- Количество вейвлет-функций нейрональных блоков равно числу входных признаков;
- В разных нейрональных-блоках могут использоваться различные вейвлет-функции;



# Визуализация ответов блоков нейросети



# Результаты решения ВНС



Средняя абсолютная ошибка решения задачи нейронными сетями (WNN –вейвлет нейронная сеть, MLP – персептрон, PLS – метод частичных наименьших квадратов) сетью на входных данных: **Initial** – исходные спектры, **PCA** – метод главных компонент (10 признаков), **DWT** – дискретное вейвлет-преобразование (32 признака), **CWT** – непрерывное вейвлет-преобразование (22 признака).

# Вейвлет-преобразование



$$A(s, t) = \frac{1}{\sqrt{s}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) * \psi^*\left(\frac{t - t_0}{s}\right) dt$$

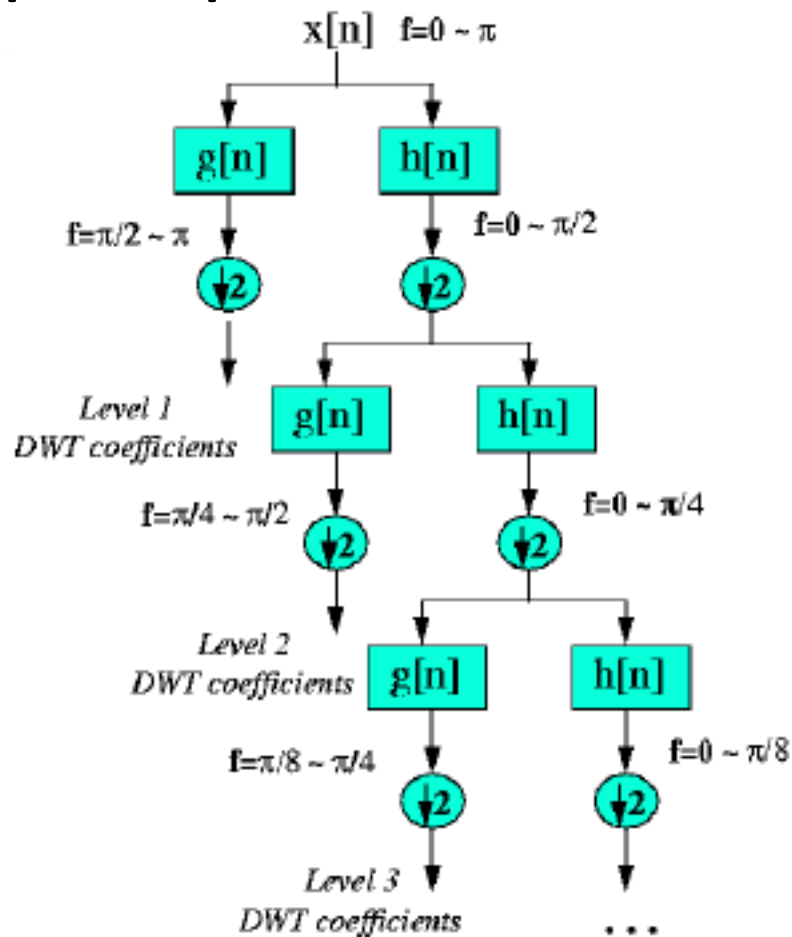
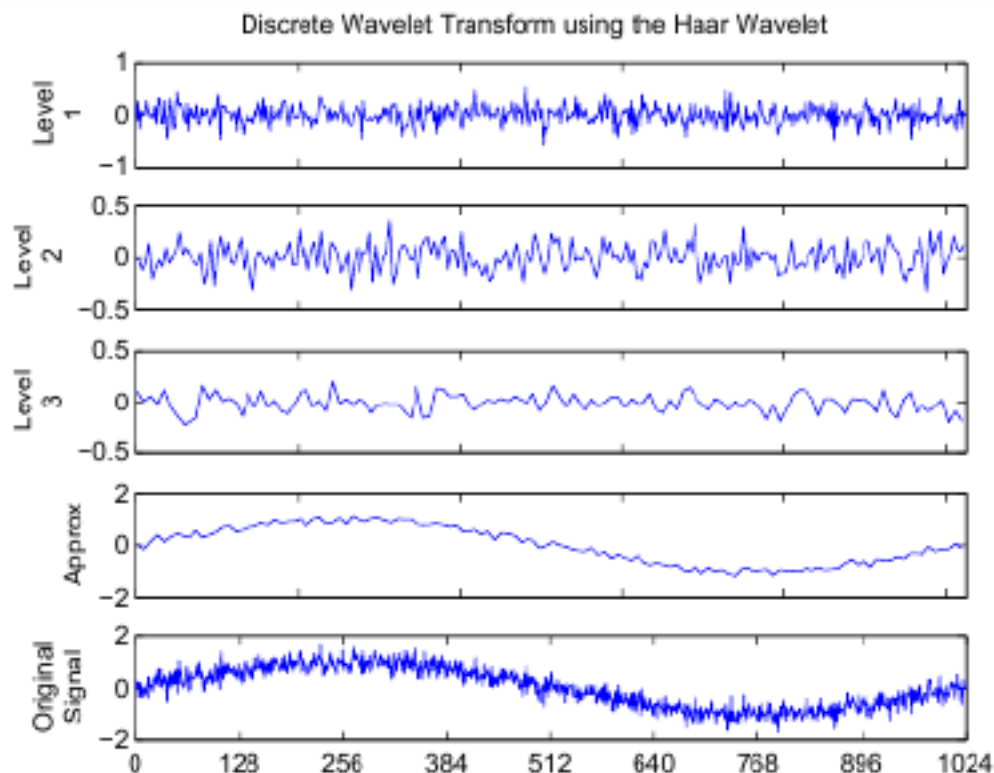
## Свойства вейвлет-функций:

1 Нулевое среднее:  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(u) du = 0$

2 Ограниченность:  $\int |\psi(t)|^2 dt < \infty$ .

3 Самоподобие

# Дискретное вейвлет-преобразование



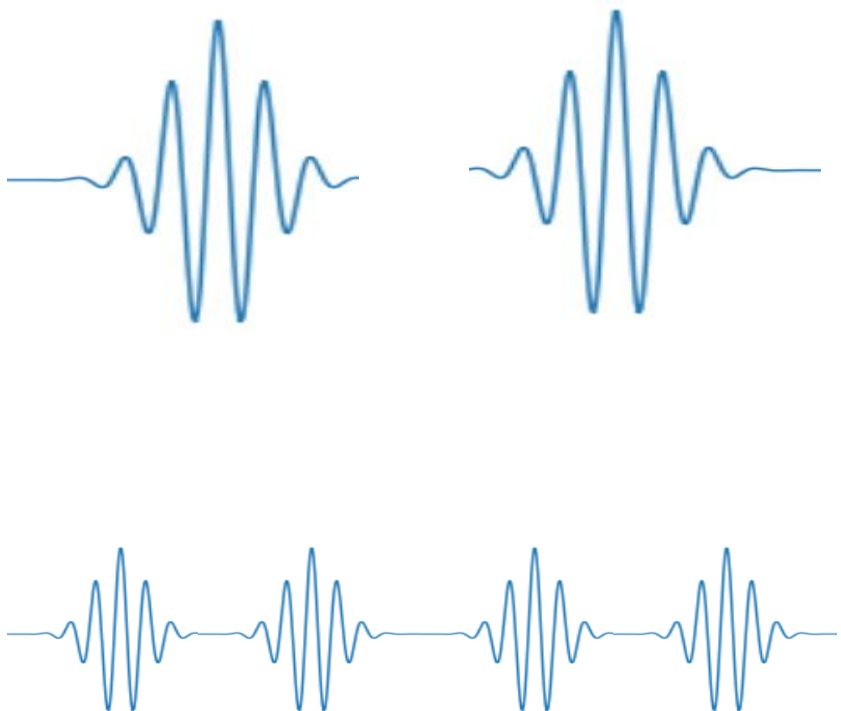
Оригинальный сигнал (sin с 10% шумом) состоит из 1024 точек;

Dilation параметр =  $2^j - 1$ ;

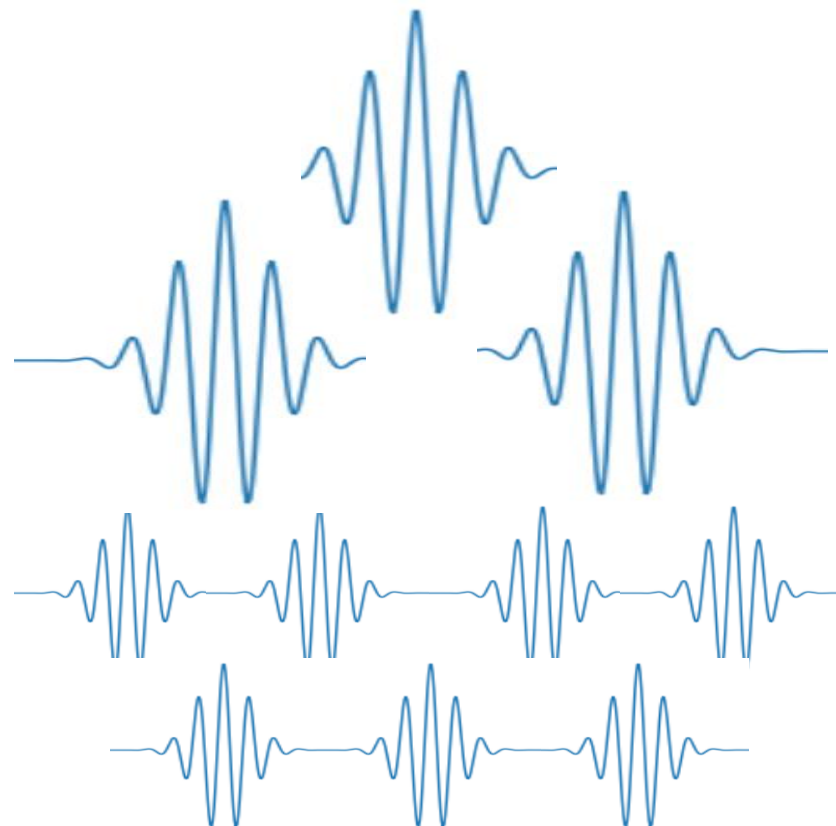
Получаем 896 точек DWT-коэффициентов и 128 scaling коэффициентов.

# Дискретное и непрерывное вейвлет-преобразование

Неперекрывающиеся окна  
вейвлет-функций

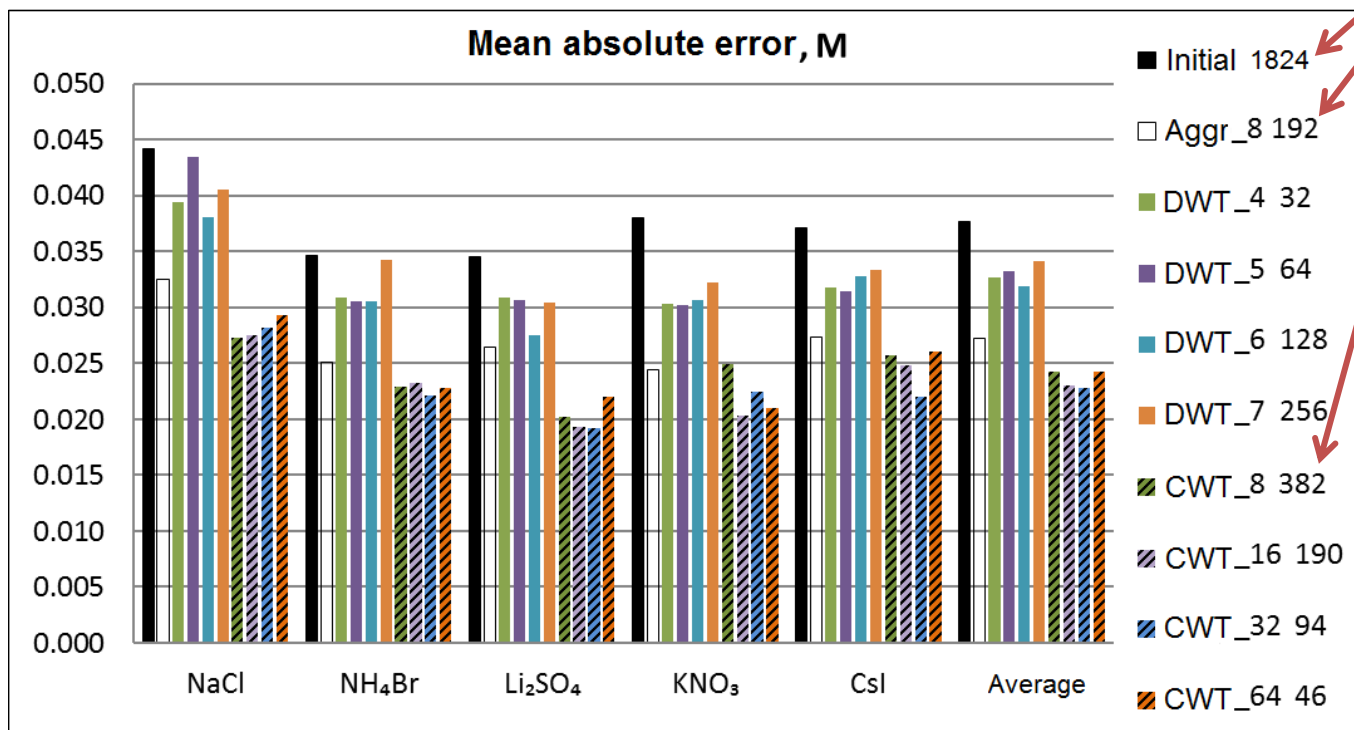


Перекрывающиеся окна  
вейвлет-функций



# Результаты

число признаков



Средняя абсолютная ошибка решения задачи нейронной сетью на входных данных: **Initial** – исходные спектры, **Aggr** – агрегированные (усреднение) данные, **DWT** – дискретное вейвлет-преобразование, **CWT** – непрерывное вейвлет-преобразование.

## Комбинаторный

- следующий ряд - все комбинации  $X_i$ ;
- нет селекции моделей;
- огромное число переменных, возрастающее от ряда к ряду;

## Комбинаторно-селективный

- следующий ряд - комбинирование переменных лучших моделей со всеми остальными  $X_i$  (парами);
- селекция заданного числа лучших моделей;
- число переменных фиксировано в ряде;

## Многорядный итеративный

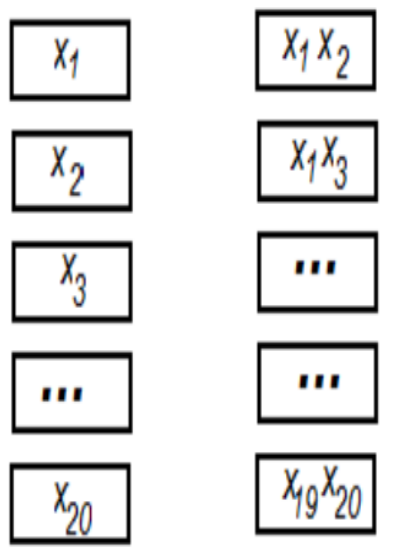
- следующий ряд - парное комбинирование лучших моделей;
- селекция заданного числа лучших моделей;
- число переменных фиксировано в ряде;

## Релаксационно итеративный

- следующий ряд - парное комбинирование лучших моделей с переменными исходного набора.
- селекция заданного числа лучших моделей;
- число переменных фиксировано в ряде;

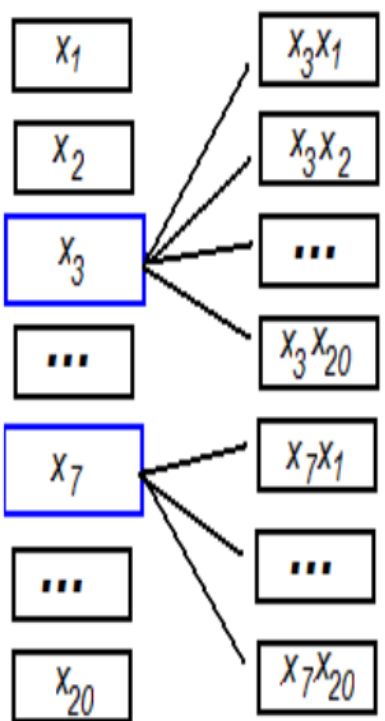
# МГУА (метод группового учета аргумента)

## Комбинаторный



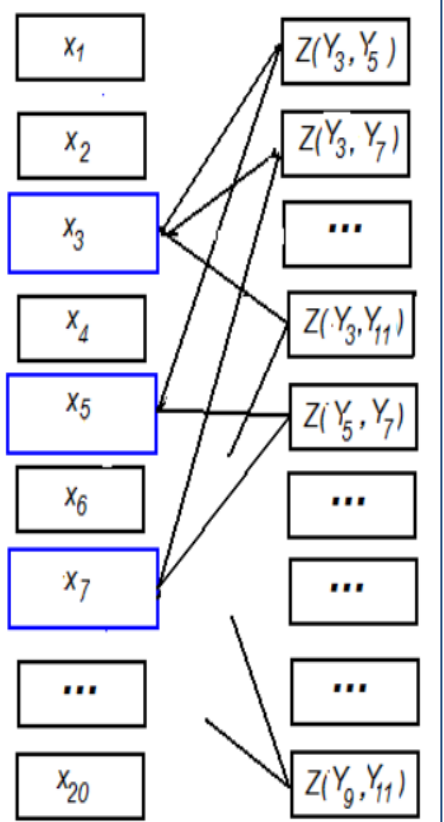
Ряд 1                      Ряд 2

## Комбинаторно-селективный



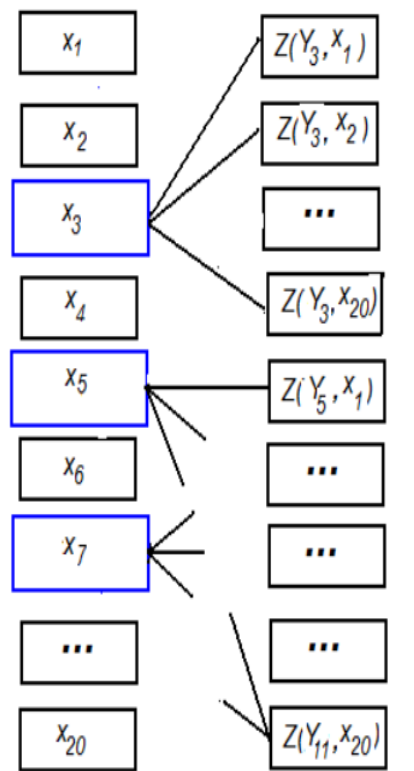
Ряд 1                      Ряд 2

## Многорядный итеративный



Ряд 1                      Ряд 2

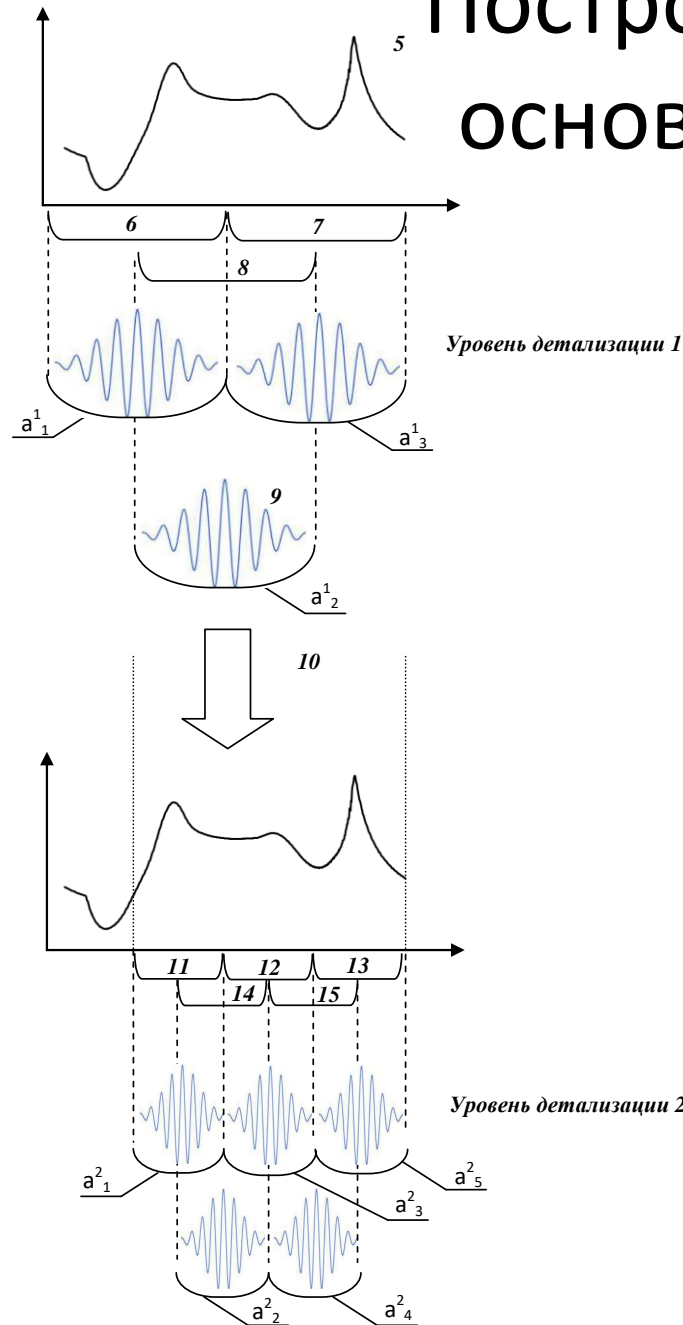
## Релаксационно итеративный



Ряд 1                      Ряд 2



# Построение вейвлет-нейросети на основе многорядного алгоритма



1. Построение моделей на основе выбранных опорных функций с заданным числом переменных. Например, для линейных функций:

$$\begin{aligned}
 y_0 &= w_{00} \\
 y_1 &= w_{10} + w_{11}a_1^1 \\
 y_2 &= w_{20} + w_{22}a_2^1 \\
 y_3 &= w_{30} + w_{31}a_1^1 + w_{32}a_2^1 \\
 y_4 &= w_{40} + w_{43}a_3^1 \\
 y_5 &= w_{50} + w_{51}a_1^1 + w_{53}a_3^1 \\
 y_6 &= w_{60} + w_{62}a_2^1 + w_{63}a_3^1 \\
 y_7 &= w_{70} + w_{71}a_1^1 + w_{72}a_2^1 + w_{73}a_3^1
 \end{aligned}$$

2. Подбор коэффициентов моделей в рамках процедуры минимизации внутреннего критерия (например, методом наименьших квадратов:  $w = (A^T A)^{-1} A^T y$ );

3. Выбор  $P_1$  лучших моделей (расчет внутреннего критерия на валидационной выборке);

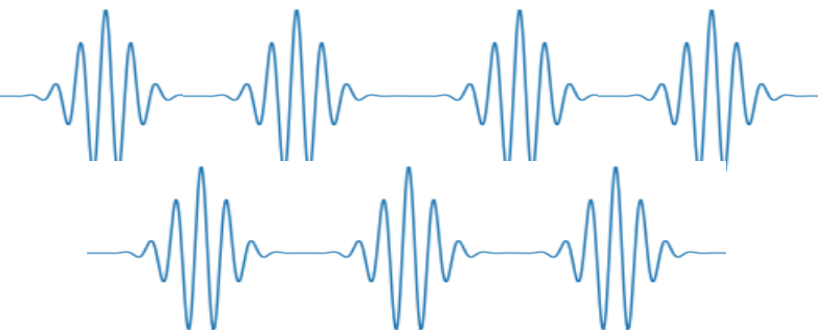
4. Проверка целесообразности использования моделей данного уровня детализации (расчет внешнего критерия на тестовом наборе);

5. Формирование набора уникальных интервалов используемых лучшими моделями;

6. Дополнение набора значимых интервалов детализованными интервалами следующего уровня порожденных внутри значимых интервалов текущего уровня.

# Многорядный алгоритм выбора вейвлет-функций

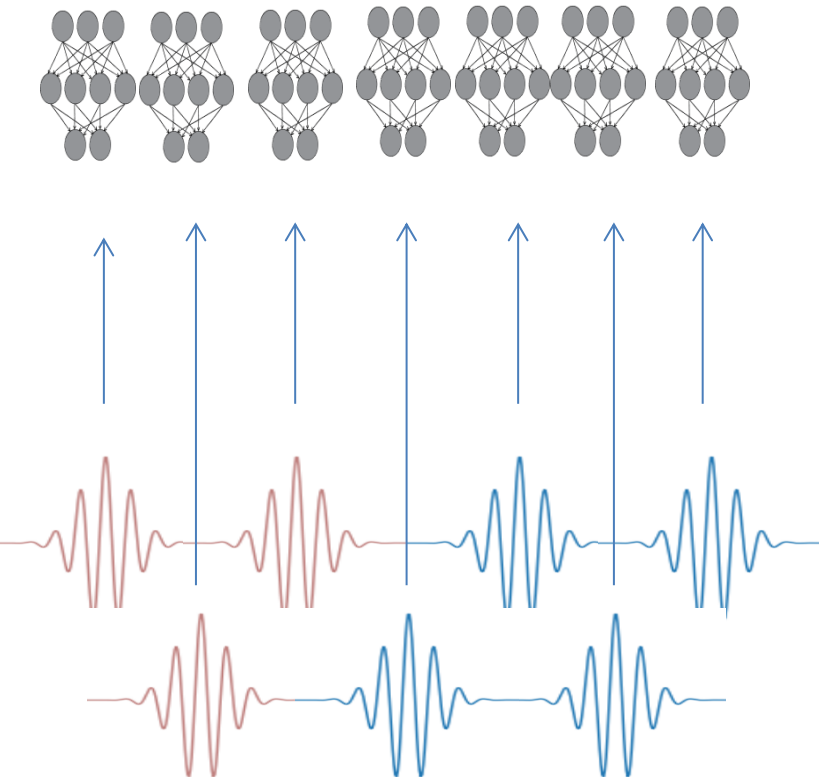
- Старт расчетов с минимальной ширины окна вейвлет-функции;
- На первом уровне вычисляются все вейвлет-коэффициенты;
- Исходная физическая обратная задача решается регрессионным методом (нейронная сеть, линейный регрессор и т.п.)



Уровень 1

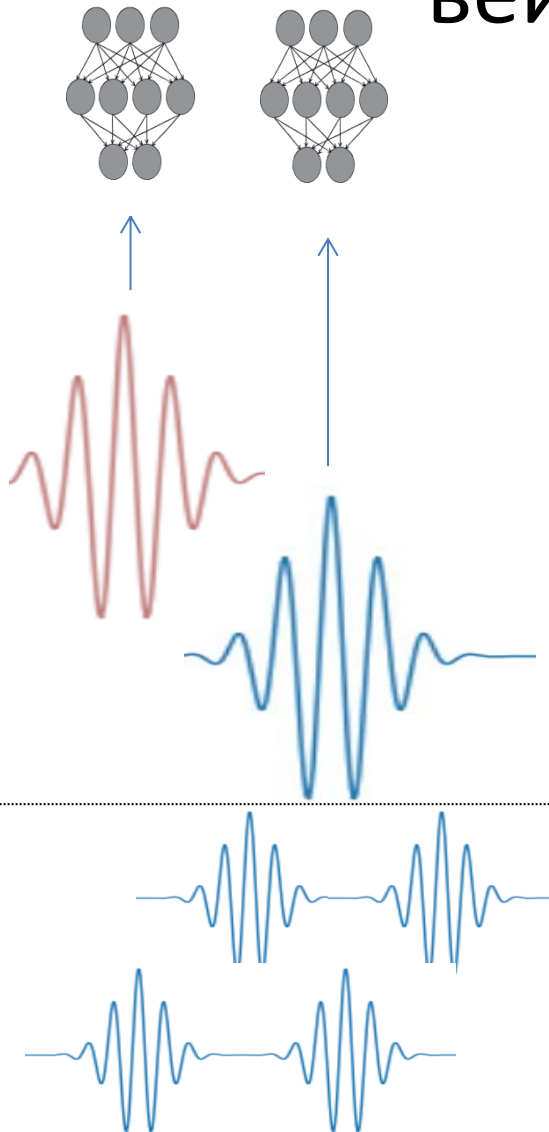
# Многорядный алгоритм выбора вейвлет-функций

- Решение физической ОЗ собственной моделью для каждой переменной по-отдельности;
- Выбор фиксированного числа лучших моделей;
- Для переменных лучших моделей дальнейшее изменение масштаба не предполагается – их следует удалить до



Уровень 1

# Многоуровневый алгоритм выбора вейвлет-функций



- На следующий уровень попадают области, продемонстрировавшие низкое качество решения задачи;

- Соседствующие области сливаются в вейвлеты следующего уровня (двукратное увеличение масштаба);

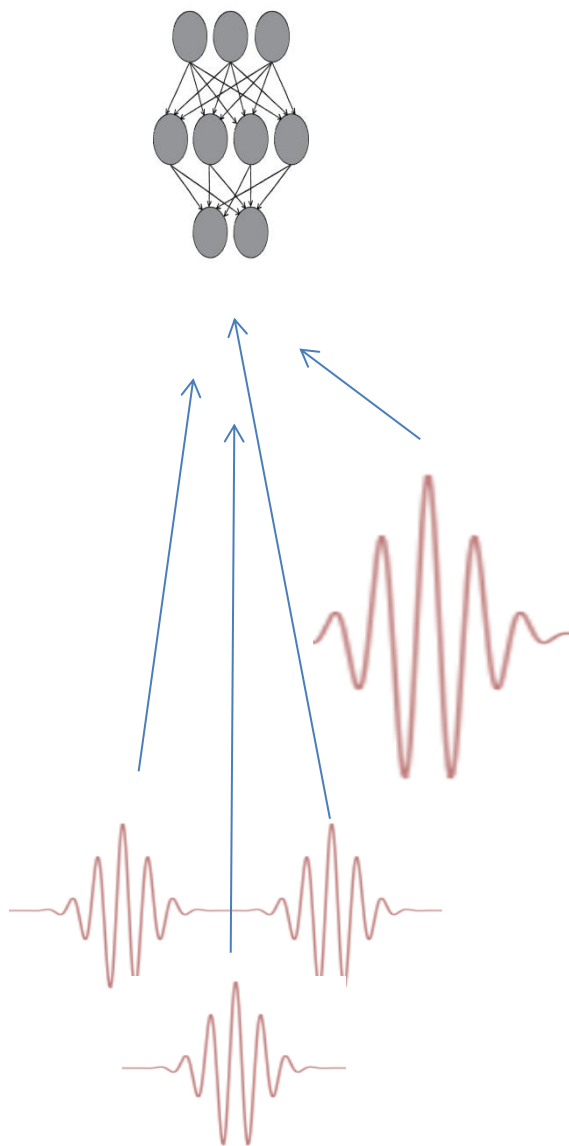
Уровень 2

- На каждом из полученных вейвлет-коэффициентов нового уровня вновь решается физическая задача, выбираются лучшие модели, плохие – отправляются на следующий уровень;

Уровень 1

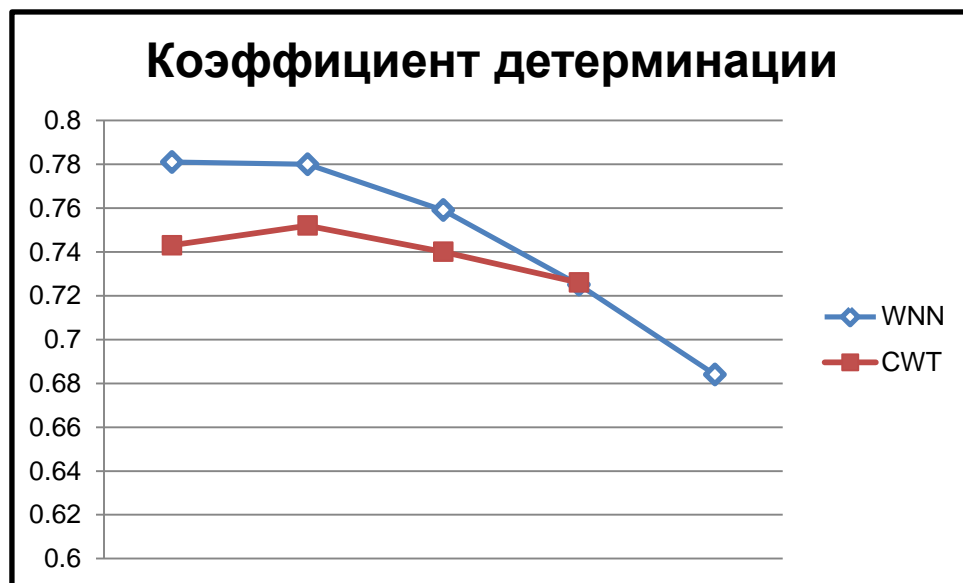
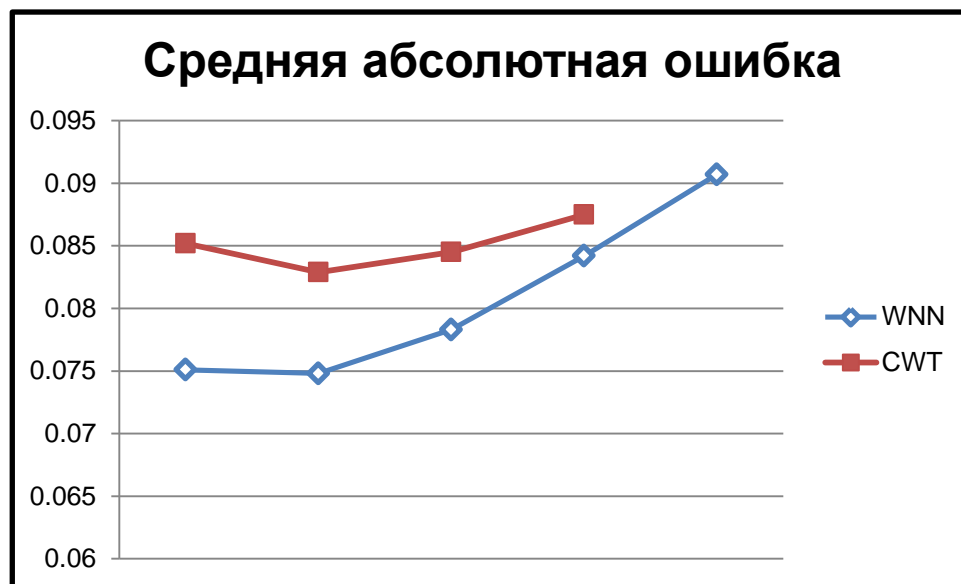
- Процедура итеративно повторяется.

# Многоуровневый алгоритм выбора вейвлет-функций



- После окончания выбора вейвлет-коэффициентов все оставшиеся (лучшие для своих уровней) вейвлет-коэффициенты используются для решения физической задачи в качестве входных переменных;
- Физическая задача решается единственным регрессором со множеством входов, представленных вейвлет-коэффициентами разных уровней

# Результаты



Спасибо за внимание