

Учет физических ограничений в предсказательных моделях химического состава стали

Яшков Даниил

МФТИ

Научный руководитель: Лобачев В.А.

09 июня 2016

Содержание

- 1 Постановка задачи
- 2 MatrixNet
- 3 MatrixNet + Линейная регрессия
- 4 MatrixNet + Кусочно-линейная регрессия
- 5 Другие алгоритмы

Общая задача

Известны:

- Все измерения, совершенные к моменту запроса
- Набор ферросплавов
- Спецификации стали

Надо определить:

- Количество каждого из ферросплавов

Условия:

- Надо минимизировать цену
- Надо удовлетворить спецификациям

Общий вид решения задачи

Разобьем задачу на две части:

- 1 **Задача построения регрессионной зависимости $y(\mathbf{x}, \mathbf{a})$**
 - y - хим. состав готовой стали
 - $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ - вектор добавлений ферросплавов
 - \mathbf{a} - неконтролируемые параметры плавки
- 2 **Задача оптимизации: $\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^T \mathbf{x}$**
 - \mathbf{c} - вектор удельных стоимостей ферросплавов
- 3 **При условии:**
 - $y(\mathbf{x}^*, \mathbf{a})$ удовлетворяет спецификациям.

Задача регрессии

Обозначения:

- $X^l = (\mathbf{x}^i, \mathbf{a}^i, y^i)_{i=1}^l$ - обучающая выборка
- y_e^i - содержание элемента e в итоговой стали в плавке i
- $\hat{y}_e = f_e(\mathbf{x}, \mathbf{a})$ - предсказание регрессионной модели
- $\mathcal{L}(y_e, \hat{y}_e)$ - функция потерь на одном объекте

Задача:

$$\sum_{i=1}^l \mathcal{L}(y_e^i, f_e(\mathbf{x}^i, \mathbf{a}^i)) \longrightarrow \min_{f_e}$$

Критерий качества, посчитанный на тестовой выборке X^t :

$$Q(X^t, f_e) = \sqrt{\frac{1}{t} \sum_{i=1}^t \left(y_e^i - f_e(\mathbf{x}^i, \mathbf{a}^i) \right)^2}$$

При этом мы хотим получить **интерпретируемую** модель!

Градиентный бустинг над решающими деревьями

Общий вид полученной модели можно представить, как:

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x), b_t \in \mathcal{B}$$

На каждой итерации минимизируется функционал качества, с заранее определенной функцией потерь $\mathcal{L}(a, y)$:

$$Q(\alpha, b, X^l) = \sum_{i=1}^l \mathcal{L}\left(\sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x_i), y_i\right) \longrightarrow \min_{\alpha, b}$$

$$b_t = \arg \min_b \sum_{i=1}^l (b(x_i) + \mathcal{L}'(f_i, y_i))^2$$

$$\alpha_t = \arg \min_{\alpha > 0} \sum_{i=1}^l \mathcal{L}(f_i + \alpha b_t(x_i), y_i)$$

$$f_i = \sum \alpha_k b_k(x_i)$$

MatrixNet

MatrixNet - градиентный бустинг над Oblivious Decision Trees:

- 1 На каждом уровне дерева рассматривается только один признак x_j
- 2 Для всех вершин дерева, находящихся на одном уровне, рассматривается одно и то же пороговое правило: $[x_j > \delta]$

Множество ODT, определенное выше, гораздо уже, чем множество всех решающих деревьев.

Построение обучающей выборки

- Формирование признаков
- Фильтрация данных
- Отбор признаков

Формирование признаков

Признаки, отражающие технологический процесс:

- масса лома, чугуна
- объем продутого кислорода
- содержание углерода
- ...

Признаки, отражающие добавления ферросплавов:

- суммарная масса добавленного элемента (по каждому элементу)
- относительная масса добавленного элемента (по каждому элементу) - отношение суммарной массы

Построение признаков ферросплавов

Дано:

- Множество исторических плавков X .
- количества добавлений ферросплавов $(x_f)_{f \in F}$ для каждой плавки
- входные анализы ферросплавов $f_e^d, f \in F, e \in E$,
 E - множество элементов,
 F - множество ферросплавов,
 d - день, когда был получен входной анализ

Найти:

- \tilde{f}_e^d - содержание элемента e в ферросплаве f в день d .

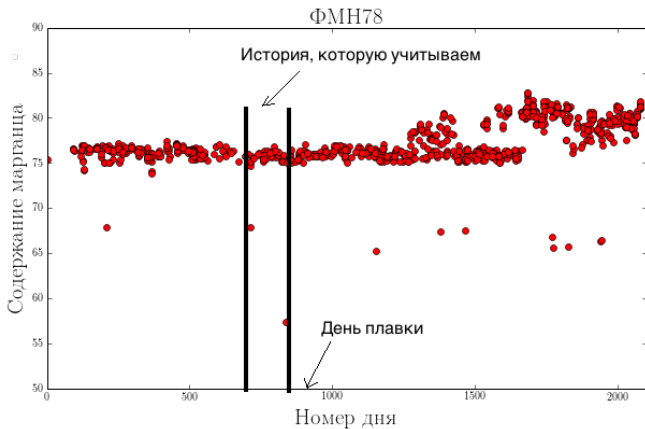


Рис.: Иллюстрация задачи поиска содержания

Построение признаков ферросплавов

Варианты построения:

- Взять среднее содержание за все время:

$$\tilde{f}_e^d = \frac{1}{N} \sum_k f_e^k,$$

N - количество входных анализов ферросплавов f за все время

- Искать в виде:

$$\tilde{f}_e^d = \frac{1}{N} \sum_{k \in [d-\delta_1, d-\delta_2]} f_e^k,$$

δ_1, δ_2 - из оптимизации $RMSE$ линейной регрессии:

$$\sum_{x \in X} \left(\alpha \sum_{f \in F} \tilde{f}_e^d(\delta_1, \delta_2) - y_e \right)^2 \longrightarrow \min_{\alpha, \delta_1, \delta_2}$$

Фильтрация данных

Данные фильтровались следующим образом:

- экспертные ограничения
- физические ограничения на усваиваемость материала
- По остаткам линейной регрессии

Сырые данные

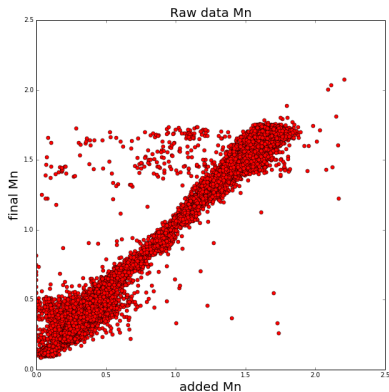
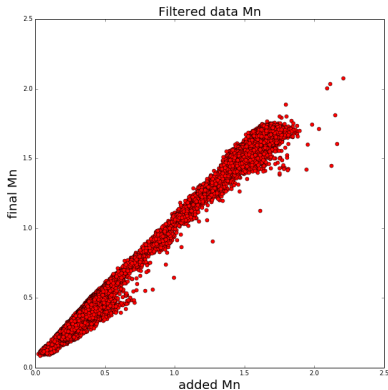


Рис.: Пример сырых данных, марганец

Отфильтрованные данные



После всех этапов фильтрации осталось около 70 000 плавков из
изначальных 120 000.

Качество модели MatrixNet

Элемент	SD	RMSE	$\frac{RMSE}{SD}$
Mn	0.46141%	0.02566%	0.05562%
Si	0.20922%	0.02177%	0.10406%

Качество MatrixNet , при

$$\tilde{f}_e^d = \frac{1}{N} \sum_k f_e^k,$$

$$RMSE_{Mn} = 0.02713$$

$$RMSE_{Si} = 0.02501$$

Интерпретируемость модели

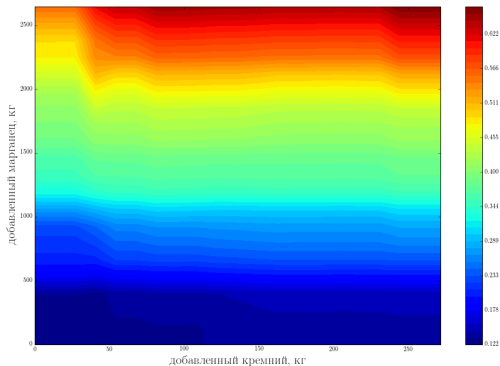


Рис.: Предсказания MatrixNet по марганцу для различных значений добавленного Mn и Si.

Интерпретируемость модели

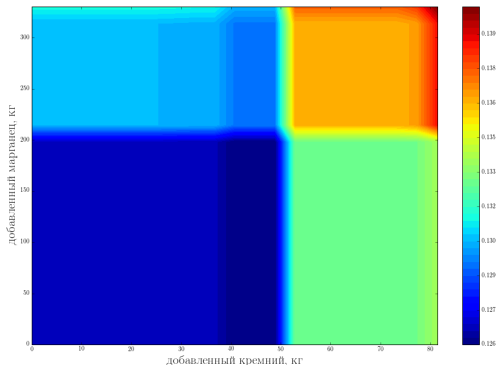


Рис.: Предсказания MatrixNet по марганцу для различных значений добавленного Mn и Si.

Объяснение

Утверждение

Пусть отсутствуют объекты обучающей выборки, для которых j -й признак принимает значения из промежутка $[a, b]$, тогда MatrixNet, обученный на этой выборке, будет принимать не более 2-х различных значений на этом промежутке, при фиксированном остальном наборе признаков.

Идея:

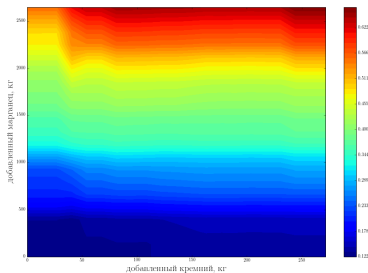
- Давайте сделаем простую и интерпретируемую модель, которая удовлетворяет физическим свойствам
- Остатки от этой модели постараемся аппроксимировать MatrixNet-ом

Качество

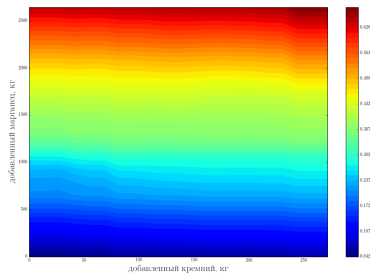
Сравним MatrixNet + ЛР с MatrixNet:

Элемент	MatrixNet	MatrixNet + LR
Mn	0.02566%	0.02538%
Si	0.02177%	0.02128%

Интерпретируемость модели

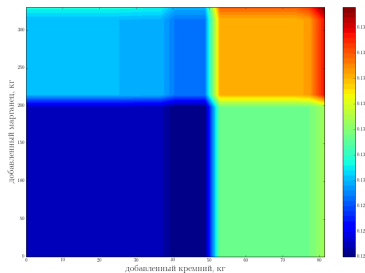


(a) MatrixNet

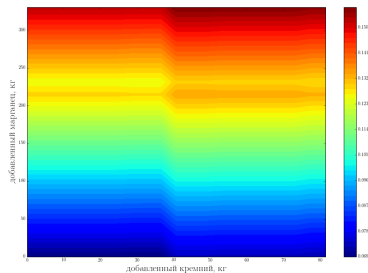


(b) MatrixNet + LR

Интерпретируемость модели



(a) MatrixNet



(b) MatrixNet + LR

Кусочно-линейная регрессия

Кусочно-линейная модель, при заданной триангуляции, однозначно строится с помощью МНК.

Обозначения:

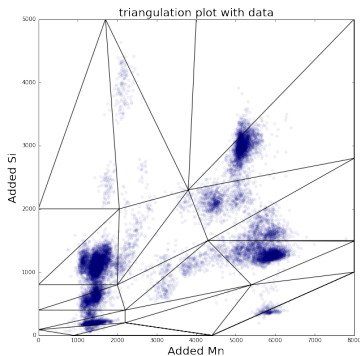
- $\lambda_i^{v_1,2,3}$ - барицентрические координаты точки x_i
- f_i значение регрессии на объекте выборки x_i
- $v_{1,2,3}$ - вершины треугольника, к которому относится x_i
- f_{v_i} - значение функции в вершинах треугольника

Хотим добавить модели физичности - добавим ограничение на изменение градиента в соседних треугольниках:

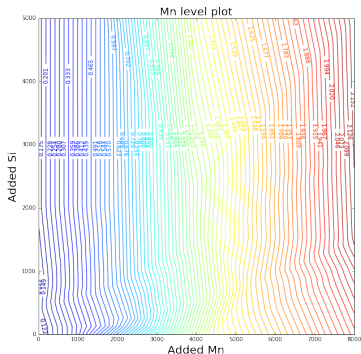
$$\min \sum_{i=1}^m |f_i - y_i|^2 + \lambda \sum_{(P^{l_1}, P^{l_2}) \in \mathcal{N}} \|\nabla f_{l_1} - \nabla f_{l_2}\|_2 \quad (1)$$

$$f_i = \lambda_i^{v_1} f_{v_1} + \lambda_i^{v_2} f_{v_2} + \lambda_i^{v_3} f_{v_3}, \forall i = 1, \dots, m \quad (2)$$

Полученная модель



(a) Выбранная триангуляция обучающей выборки.



(b) Линии уровня КЛР для различных значений добавленного Mn и Si.

Результаты

Элемент	MNet	MNet + LR	MNet + КЛР
Mn	0.02566%	0.02538%	0.02503%
Si	0.02177%	0.02128%	0.02115%

Нейросети

Рассмотрено несколько различных архитектур нейросетей:

- Классическая нейросеть с 2-мя полносвязными слоями
- Нейросеть с разделением признаков на ферросплавы и остальные (отсутствуют связи между этими группами)
- Нейросеть предсказывающая сразу несколько хим. элементов

Лучшее качество, которое при этом удалось достичь, было:

$$RMSE_{Mn} = 0.03073,$$

$$RMSE_{Si} = 0.0248,$$

Что, как мы видим, значительно уступает MatrixNet

Заключение

Результаты:

- Предложен двухэтапный подход к построению регрессионной модели.
- Предложен метод построения признакового описания.
- Построена эффективная и интерпретируемая модель, предсказывающая химический состав стали.