

АНОТАЦІЯ

Крикун В. А. Метод та програмні засоби інтерпретації моделей машинного навчання нелінійних динамічних об'єктів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 121 Інженерія програмного забезпечення. – Національний університет «Одеська політехніка» Міністерства освіти і науки України, Одеса, 2024.

Роботу присвячено вирішенню актуальної науково-практичної задачі, яка полягає у створенні методу інтерпретації моделей машинного навчання нелінійних динамічних об'єктів з неперервними характеристиками та його застосуванню у вигляді програмно-алгоритмічних засобів ідентифікації як складової частини інтелектуальних систем.

Актуальність теми дослідження визначається наявним протиріччям між сталим ускладненням моделей машинного навчання при ідентифікації нелінійних динамічних об'єктів типу «чорна скриня», з одного боку, та зростанням труднощів інтерпретації цих моделей людиною — з іншого боку. Встановлене протиріччя долається з застосуванням методу побудови сурогатних моделей у вигляді непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри, що дозволяє спростити структуру сурогатних моделей та, завдяки урахуванню нелінійних та динамічних властивостей моделей машинного навчання, підвищити точність ідентифікації сурогатних моделей.

Метою роботи є підвищення точності сурогатних моделей шляхом розвитку методу інтерпретації моделей машинного навчання нелінійних динамічних об'єктів за допомогою непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри та реалізації запропонованого методу у вигляді програмно-алгоритмічних засобів ідентифікації неперервних об'єктів у складі інтелектуальних систем.

Для досягнення вказаної мети дослідження в роботі поставлено і розв'язано такі задачі:

– виконано аналіз існуючих методів інтерпретації моделей машинного навчання неперервних нелінійних динамічних об'єктів, визначено базові проблеми інтерпретації нейромережових моделей; обґрунтовано вибір напрямку досліджень в області побудови сурогатних моделей у вигляді інтегральних непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри для аналітичного опису нелінійних динамічних об'єктів;

– запропоновано використання непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри в якості сурогатних моделей для інтерпретації нейронних мереж з часовими затримками; встановлено зв'язок в аналітичному вигляді між нейронними мережами з часовими затримками та непараметричними динамічними моделями на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри для підвищення точності сурогатних моделей неперервних нелінійних динамічних об'єктів;

– розвинуто метод інтерпретації нейронних мереж з часовими затримками шляхом побудови сурогатних моделей у вигляді непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри для опису нелінійних динамічних об'єктів із забезпеченням прийнятної точності моделювання;

– розроблено інформаційну технологію інтерпретації моделей машинного навчання нелінійних динамічних об'єктів, що ґрунтується на використанні нейронної мережі з часовими затримками для ідентифікації нелінійної динамічної моделі об'єкта за даними експерименту «вхід–вихід» та побудови сурогатної моделі у вигляді непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри із забезпеченням прийнятної точності моделювання для інтерпретації нейронної мережі;

– розроблено інструментальні засоби комп'ютерного моделювання для побудови нейромережових моделей нелінійних динамічних об'єктів та сурогатних моделей для їх інтерпретації в системі ідентифікації неперервних об'єктів;

застосовано розроблений метод та інструментальні засоби для розв'язання прикладних задач ідентифікації неперервних об'єктів.

Наукова новизна отриманих результатів, які виносяться на захист, полягає в наступному.

– *Вперше запропоновано* сурогатну модель у вигляді непараметричної динамічної моделі на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри для інтерпретації нейронних мереж з часовими затримками, побудованих за результатами експерименту «вхід–вихід», яка, на відміну від відомих моделей, дозволяє одночасно спростити структуру сурогатних моделей та підвищити точність їх ідентифікації, завдяки урахуванню нелінійних та динамічних властивостей моделей машинного навчання.

– *Отримав подальший розвиток* метод оцінки ядер Вольтерри за допомогою нейронних мереж з часовими затримками шляхом встановлення аналітичного зв'язку між нейронною мережею з активацією у вигляді лінійного випрямляча та непараметричною динамічною моделлю на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри, що дозволяє підвищити точність ідентифікації нелінійних динамічних об'єктів у вигляді поліномів Вольтерри.

– *Вперше запропоновано* метод інтерпретації моделей машинного навчання у вигляді нейронних мереж з часовими затримками, збудованими за даними експерименту «вхід–вихід» шляхом побудови сурогатної моделі на основі непараметричних динамічних моделей у вигляді інтегро-степеневих поліномів Вольтерри за допомогою встановленого аналітичного зв'язку між нейронною мережею та ядрами Вольтерри. Це дозволяє підвищити точність та зменшити розмірність сурогатних моделей при ідентифікації нелінійних динамічних об'єктів.

– *Удосконалено* математичну модель оцінки якості програмного забезпечення інтерпретації моделей машинного навчання, яка відрізняється від існуючих одночасним врахуванням метрик функціональності та складності, що дозволяє кількісно виразити здатність до інтерпретації для формального

порівняння сурогатних моделей, збудованих різними методами та автоматизації відбору моделей машинного навчання та сурогатних моделей.

Практичне значення одержаних результатів полягає у розробці інструментальних програмно-алгоритмічних засобів інформаційної технології інтерпретації моделей машинного навчання нелінійних динамічних об'єктів, які реалізують обчислювальні алгоритми ідентифікації нелінійної динамічної моделі об'єкта за даними експерименту «вхід–вихід» за допомогою нейронної мережі з часовими затримками та побудови сурогатної моделі у вигляді непараметричних динамічних моделей на основі інтегро-степеневих поліномів Вольтерри із забезпеченням прийнятної точності моделі машинного навчання, а також у впровадженні створених інструментальних засобів у навчальний процес та наукові дослідження.

На основі створених ІЗ розроблено ефективні хмарні сервіси для вирішення ресурсномістких задач моделювання, що забезпечує високу обчислювальну потужність та швидкість побудови моделей в задачах ідентифікації неперервних об'єктів.

Розроблені ІЗ та хмарні сервіси впроваджено в ТОВ «Дискрет» (м. Одеса), де вони використовуються для ідентифікації моделей тензометричного зважування транспортних засобів у русі та їх інтерпретації.

Результати, отримані в дисертаційній роботі, використано у навчальному процесі Національного університету «Одеська політехніка» при викладанні дисциплін «Інтелектуальні системи» та «Математичне моделювання нелінійних динамічних процесів» на кафедрі комп'ютеризованих систем та програмних технологій; а також застосовано при розробці тем магістерських кваліфікаційних робіт.

Об'єкт досліджень – процес інтерпретації моделей машинного навчання неперервних нелінійних динамічних об'єктів.

Предмет досліджень – моделі та методи інтерпретації нейромережових моделей нелінійних динамічних об'єктів, орієнтовані на впровадження в системах ідентифікації неперервних об'єктів.

Ключові слова: інтерпретація моделей машинного навчання, нейронні мережі з часовими затримками, нелінійні динамічні об'єкти, непараметричні динамічні моделі, поліноми Вольтерри, сурогатні моделі, ідентифікація.

Список публікацій здобувача

Наукові праці, в яких опубліковано основні наукові результати дисертації.

1. Krykun V. Improving the accuracy of the neural network models interpretation of nonlinear dynamic objects. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки*. 2023. Вип. 24. С. 45–55. DOI: 10.32626/2308-5916.2023-24.45-55. *Видання включено до переліку наукових фахових видань України, категорія «Б».*

<http://mcm-tech.kpnu.edu.ua/issue/view/17449>

2. Mathematical models of software quality assurance for interpretation of dynamic neural networks / O. Fomin, V. Krykun, A. Orlov et al. *Вчені записки ТНУ імені В.І. Вернадського. Серія: Технічні науки*. 2023. Том 34 (73), № 5. С. 250–256. DOI: 10.32782/2663-5941/2023.5/39. *Видання включено до переліку наукових фахових видань України, категорія «Б».*

<https://tech.vernadskyjournals.in.ua/34-73-5>

3. Models of dynamic objects with significant nonlinearity based on time-delay neural networks / O. Fomin, V. Speranskyu, V. Krykun et al. *Вісник черкаського державного технологічного університету. Технічні науки*. 2023. № 3. С. 97–112. DOI: 10.24025/2306-4412.3.2023.288284. *Видання включено до переліку наукових фахових видань України, категорія «Б».*

<http://vtn.chdtu.edu.ua/issue/view/16885>

4. Fomin O.O., Krykun, V.A. Assessment of the Quality of Neural Network Models Based on a Multifactorial Information Criterion. *Вісник сучасних інформаційних технологій*. 2024. Том 7, № 1. С. 13–23. DOI: 10.15276/hait.07.2024.1. *Видання включено до переліку наукових фахових видань України, категорія «Б».*

<https://hait.od.ua/index.php/journal/article/view/201>

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації.

5. Interpretation of Dynamic Models Based on Neural Networks in the Form of Integral-Power Series / O. Fomin et al. ; in: Arsenyeva, O., Romanova, T., Sukhonos, M., Tsegelnyk, Y. (eds). *Smart Technologies in Urban Engineering. STUE 2022. Lecture Notes in Networks and Systems*. Springer, Cham, 2022. Vol. 536. P. 258–265. DOI: 10.1007/978-3-031-20141-7_24. Видання проіндексовано у базах даних *Web of Science Core Collection* та *Scopus*.

<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-20141-7?page=2>

6. Interpretation Method for Dynamic States Neural Network Models / S. Polozhaenko et al. *IEEE 3rd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC)*. Kyiv, Ukraine, 2022. P. 1–5. DOI: 10.1109/SAIC57818.2022.9923008. Видання проіндексовано у базі даних *Scopus*.

<https://ieeexplore.ieee.org/xpl/conhome/9922952/proceeding?isnumber=9922911&pageNumber=2>

7. Крикун В. А., Фомін О. О. Інтерпретація динамічних моделей у вигляді нейронних мереж з часовими затримками. *Матеріали Дванадцятій Міжнародної наукової конференції студентів та молодих учених «Сучасні інформаційні технології – 2022»*. Одеса, Україна, 2022. С. 140-141.

<http://dspace.opu.ua/jspui/handle/123456789/12912>

8. Use of dynamic neural networks for modeling nonlinear objects with significant nonlinearity / S. Polozhaenko et al. *Збірник тез IV Міжнародної науково-практичної Інтернет-конференції "Математика та інформатика в науці й освіті: виклики сучасності"*. Вінниця, Україна, 2023. С. 121-124.

<https://press.vntu.edu.ua/index.php/vntu/catalog/book/791>

9. Крикун В. А., Фомін О. О. Нелінійне моделювання об'єктів на основі динамічних нейронних мереж. *Матеріали Тринадцятій Міжнародної наукової конференції студентів та молодих учених «Сучасні інформаційні технології – 2023»*. Одеса, Україна, 2023. С. 153-155.

<http://dspace.opu.ua/jspui/handle/123456789/14172>

10. Use of Dynamic Neural Networks for Modeling Nonlinear Objects with Significant Nonlinearity / O. Fomin et al. *18th Conference on Computer Science and Intelligence Systems*. Warsaw, Poland, 2023. P. 97–102. DOI: 10.15439/2023F3874.

<https://annals-csis.org/proceedings/2023/communication.html>

11. Modeling of the agricultural crops development using satellite imagery / O. Fomin et al. *Біоінтенсивні та SMART-технології у тваринництві: матеріали II Міжнародної науково-практичної конференції науково-педагогічних працівників та молодих науковців*. Одеса, Україна, 2023. С. 10–14.

<https://osau.edu.ua/wp-content/uploads/2023/11/TEZY-2023-II-Mizhn-konf-NNIBtaA-2906.pdf>

12. Крикун В. А. Математична модель оцінки якості програмного забезпечення інтерпретації моделей машинного навчання. *Комп'ютеризовані системи та програмні технології*. 2023. № 1. С. 7–11.

https://ccs.od.ua/wp-content/uploads/journal/cspt_1_2023.pdf

ABSTRACT

V. Krykun. Method and software tools for interpreting machine learning models of nonlinear dynamic objects. – Qualifying scientific work on the rights of a manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Philosophy in specialty 121 Software Engineering. – Odessa Polytechnic National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Odessa, 2024.

The dissertation is devoted to solving an urgent scientific and practical problem, which is to create a method for interpreting machine learning models of nonlinear dynamic objects with continuous characteristics and its application in the form of software and algorithmic identification tools as an integral part of intelligent systems.

The relevance of the research topic is determined by the existing contradiction between the growing complexity of machine learning models for identifying nonlinear dynamic objects of the "black box" type, on the one hand, and the growing difficulty of interpreting these models by humans, on the other hand. This contradiction is overcome

by applying the method of building surrogate models in the form of nonparametric dynamic models based on integral-power Volterra polynomials, which allows simplifying the structure of surrogate models and, due to the consideration of nonlinear and dynamic properties of machine learning models, increasing the accuracy of surrogate model identification.

The purpose of the study is to improve the accuracy of surrogate models by developing a method for interpreting machine learning models of nonlinear dynamic objects using nonparametric dynamic models based on integral-power Volterra polynomials and implementing the proposed method in the form of software and algorithmic tools for identifying continuous objects as part of intelligent systems.

To achieve the research purpose, the following tasks were set and solved:

- the analysis of existing methods for interpreting machine learning models of continuous nonlinear dynamic objects is carried out, the basic problems of interpreting neural network models are identified; the choice of research direction in the field of building surrogate models in the form of integral nonparametric dynamic models based on integral-power Volterra polynomials for the analytical description of nonlinear dynamic objects is substantiated;

- the use of nonparametric dynamic models based on Volterra integral polynomials as surrogate models for the interpretation of neural networks with time delays was proposed; an analytical connection between neural networks with time delays and nonparametric dynamic models based on Volterra integral polynomials was established to improve the accuracy of surrogate models of continuous nonlinear dynamic objects;

- a method for interpreting neural networks with time delays was developed by constructing surrogate models in the form of nonparametric dynamic models based on Volterra integral-power polynomials to describe nonlinear dynamic objects with acceptable modeling accuracy;

- an information technology for interpreting machine learning models of nonlinear dynamic objects based on the use of a neural network with time delays to identify a nonlinear dynamic model of an object based on input-output experiment data

and to build surrogate models in the form of nonparametric dynamic models based on integral-power Volterra polynomials with acceptable modeling accuracy for interpreting the neural network was developed;

– computer modeling tools for constructing neural network models of nonlinear dynamic objects and surrogate models for their interpretation in continuous object identification systems was developed; the developed method and tools to solve applied problems of continuous object identification was applied.

The scientific novelty of the results presented for defense is as follows.

– For the first time, a surrogate model in the form of a nonparametric dynamic model based on integral-power Volterra polynomials is proposed for interpreting time delay neural networks built on the results of an input-output experiment, which, unlike the known models, allows simultaneously simplifying the structure of surrogate models and increasing the accuracy of their identification by taking into account the nonlinear and dynamic properties of machine learning models.

– The method of estimating Volterra kernels using time delay neural networks was further developed by establishing an analytical connection between a neural network with activation in the form of a linear rectifier and a nonparametric dynamic model based on integral-power Volterra polynomials, which allows to increase the accuracy of identification of nonlinear dynamic objects in the form of Volterra polynomials.

– For the first time, a method for interpreting machine learning models in the form of time delay neural networks built from input-output experiment data is proposed by constructing a surrogate model based on nonparametric dynamic models in the form of integral-power Volterra polynomials using the established analytical relationship between the neural network and Volterra kernels. This makes it possible to increase the accuracy and reduce the dimensionality of surrogate models when identifying nonlinear dynamic objects.

– A mathematical model for assessing the quality of machine learning model interpretation software has been improved, which differs from the existing ones by simultaneously taking into account the functionality and complexity metrics, which

allows quantifying the interpretation ability for formal comparison of surrogate models built by different methods and automating the selection of machine learning models and surrogate models.

The practical significance of the obtained results lies in the development of instrumental software and algorithmic means of information technology for interpreting machine learning models of nonlinear dynamic objects, which implement computational algorithms for identifying a nonlinear dynamic model of an object based on the data of an input-output experiment using a time delay neural network and building surrogate models in the form of nonparametric dynamic models based on integral-power Volterra polynomials with acceptable accuracy.

On the basis of the created tools, effective cloud services for solving identification tasks have been developed. These tools ensure the speed of building of continuous objects models due to high computing power.

The developed software and cloud services have been implemented in Diskret LLC (Odesa), where they are used to identify models of strain gauge weighing of vehicles in motion and their interpretation.

The results obtained in this thesis are used in the educational process of the Odessa Polytechnic National University in teaching the disciplines "Intelligent Systems" and "Mathematical Modeling of Nonlinear Dynamic Processes" at the Department of Computerized Systems and Software Technologies; and are also used in the development of topics for master's qualification works.

The object of research is the process of interpreting machine learning models of continuous nonlinear dynamic objects.

The subject of research is models and methods for interpreting neural network models of nonlinear dynamic objects, focused on implementation in continuous object identification systems.

Keywords: interpretation of machine learning models, time delay neural networks, nonlinear dynamic objects, nonparametric dynamic models, Volterra polynomials, surrogate models, identification.

List of publications of the applicant

Scientific works in which the main scientific results of the dissertation are published.

1. Krykun V. Improving the accuracy of the neural network models interpretation of nonlinear dynamic objects. *Mathematical and computer modelling. Series: Technical sciences*. 2023. Issue 24. P. 45–55. DOI: 10.32626/2308-5916.2023-24.45-55. *The issue is included in the list of scientific professional publications of Ukraine, category "B"*.

<http://mcm-tech.kpnu.edu.ua/issue/view/17449>

2. Mathematical models of software quality assurance for interpretation of dynamic neural networks / O. Fomin, V. Krykun, A. Orlov et al. *Scientific notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. Series: Technical Sciences*. 2023. Vol. 34 (73), № 5. P. 250–256. DOI: 10.32782/2663-5941/2023.5/39. *The issue is included in the list of scientific professional publications of Ukraine, category "B"*.

<https://tech.vernadskyjournals.in.ua/34-73-5>

3. Models of dynamic objects with significant nonlinearity based on time-delay neural networks / O. Fomin, V. Speransky, V. Krykun et al. *Bulletin of Cherkasy State Technological University. Technical Sciences*. 2023. № 3. P. 97–112. DOI: 10.24025/2306-4412.3.2023.288284. *The issue is included in the list of scientific professional publications of Ukraine, category "B"*.

<http://vtn.chdtu.edu.ua/issue/view/16885>

4. Fomin O.O., Krykun, V.A. Assessment of the Quality of Neural Network Models Based on a Multifactorial Information Criterion. *Herald of Advanced Information Technology*. 2024. Vol. 7, № 1. P. 13–23. DOI: 10.15276/hait.07.2024.1. *The issue is included in the list of scientific professional publications of Ukraine, category "B"*.

<https://hait.od.ua/index.php/journal/article/view/201>

Scientific works that confirm the approbation of the dissertation materials.

5. Interpretation of Dynamic Models Based on Neural Networks in the Form of Integral-Power Series / O. Fomin et al. ; in: Arsenyeva, O., Romanova, T., Sukhonos, M., Tsegelnyk, Y. (eds). *Smart Technologies in Urban Engineering. STUE 2022. Lecture*

Notes in Networks and Systems. Springer, Cham, 2022. Vol. 536. P. 258–265. DOI: 10.1007/978-3-031-20141-7_24. *The issue is indexed in the Web of Science Core Collection and Scopus databases.*

<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-20141-7?page=2>

6. Interpretation Method for Dynamic States Neural Network Models / S. Polozhaenko et al. *IEEE 3rd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC)*. Kyiv, Ukraine, 2022. P. 1–5. DOI: 10.1109/SAIC57818.2022.9923008. *The issue is indexed in the Scopus database.*

<https://ieeexplore.ieee.org/xpl/conhome/9922952/proceeding?isnumber=9922911&pageNumber=2>

7. Krykun V., Fomin O. Interpretation of dynamic models in the form of neural networks with time delays. *Proceedings of the Twelfth International Scientific Conference of Students and Young Scientists «Modern Information Technology – 2022»*. Odessa, Ukraine, 2022. P. 140-141.

<http://dspace.opu.ua/jspui/handle/123456789/12912>

8. Use of dynamic neural networks for modeling nonlinear objects with significant nonlinearity / S. Polozhaenko et al. *Proceedings of the IV International Scientific and Practical Internet Conference "Mathematics and Informatics in Science and Education: Challenges of Modernity"*. Vinnytsia, Ukraine, 2023. P. 121-124.

<https://press.vntu.edu.ua/index.php/vntu/catalog/book/791>

9. Krykun V., Fomin O. Nonlinear modeling of objects based on dynamic neural networks. *Proceedings of the Thirteenth International Scientific Conference of Students and Young Scientists «Modern Information Technology – 2023»*. Odessa, Ukraine, 2023. P. 153-155.

<http://dspace.opu.ua/jspui/handle/123456789/14172>

10. Use of Dynamic Neural Networks for Modeling Nonlinear Objects with Significant Nonlinearity / O. Fomin et al. *18th Conference on Computer Science and Intelligence Systems*. Warsaw, Poland, 2023. P. 97–102. DOI: 10.15439/2023F3874.

<https://annals-csis.org/proceedings/2023/communication.html>

11. Modeling of the agricultural crops development using satellite imagery / O. Fomin et al. *Biointensive and SMART technologies in animal husbandry*: Proceedings of the II International Scientific and Practical Conference of Academic Staff and Young Scientists. Odesa, Ukraine, 2023. P. 10–14.

<https://osau.edu.ua/wp-content/uploads/2023/11/TEZY-2023-II-Mizhn-konf-NNIBtaA-2906.pdf>

12. Krykun V. A mathematical model for assessing the quality of software for interpreting machine learning models. *Computerized systems and software technologies*. 2023. № 1. P. 7–11.

https://ccs.od.ua/wp-content/uploads/journal/cspt_1_2023.pdf