

фили отображают резонанс в металлических трубках. Для исследуемых образцов зарегистрирован широкий профиль тангенциальных мод с максимумом при 1538 см^{-1} . Эта полоса обусловлена наличием металлических трубок малого диаметра (около 0.9 нм). Дополнительный узкий пик при 1593 см^{-1} на фоне широкой полосы связан с присутствием полупроводниковых трубок. Можно сделать вывод о том, что образцы данного типа содержат смесь металлических и полупроводниковых трубок, чаще всего в виде связок отдельных нанотрубок, с указанным выше диаметром.

Таким образом, были проведены детальные исследования структурных свойств углеродных нанотрубок, в частности, оценены их длина и диаметр. Путем анализа спектров КР углеродных нанотрубок, полученных разложением СО, были получены значения диаметров УНТ, а также определен тип проводимости нанотрубок в исследуемых образцах.

Литература

1. Chiang I.W., Brinson B.E., Huang A.Y. *et al.* Purification and Characterization of Single-Wall Carbon Nanotubes (SWNTs) Obtained from the Gas-Phase Decomposition of CO (HiPco Process) // J. Phys. Chem., 2001. P.8297.
2. Alvarez L., Righi A., Rols S. *et al.* Excitation energy dependence of the Raman spectrum of single-walled carbon nanotubes // Chem. Phys. Lett., 2000. P. 441–447.
3. Alvarez L., Righi A., Guillard T. *et al.* Resonant Raman study of the structure and electronic properties of single-wall carbon nanotubes // Chem. Phys. Lett., 2000. P. 186–190.
4. Alvarez L., Righi A., Rols S. *et al.* Diameter distribution of single wall carbon nanotubes in nanobundles // Eur. Phys. J., 2000. P. 201–205.

НЕЙРОСЕТЕВОЙ АНАЛИЗ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ

А. А. Логиновский

Во многих случаях процессы в природных и технических системах могут быть описаны временными рядами, представляющими значения системных параметров в последовательные моменты времени [1–2].

Существуют две основные цели анализа временных рядов: определение природы ряда и прогнозирование (предсказание будущих значений временного ряда по настоящим и прошлым значениям). Модель может быть использована для интерпретации конкретных данных (например, для понимания сезонного изменения курсов валют) и позволяет предсказывать будущие значения временного ряда путем их экстраполяции [1–2]. В результате прогнозирования уменьшается риск при принятии решений. Прогноз обычно получается ошибочным, но ошибка зависит от исполь-

зуемой прогнозирующей системы. Предоставляя прогноз больше ресурсов, мы можем увеличить точность прогноза.

Большинство методов исследования временных рядов включает различные способы фильтрации шума, позволяющие увидеть регулярную составляющую более отчетливо. Большинство регулярных составляющих временных рядов принадлежит к двум классам: они являются либо трендом, либо сезонной составляющей. Тренд представляет собой общую систематическую линейную или нелинейную компоненту, которая может изменяться во времени. Сезонная составляющая – это периодически повторяющаяся компонента. Оба эти вида регулярных компонент часто присутствуют в ряде одновременно [1-2]. Первым шагом выделения тренда является сглаживание. Сглаживание всегда включает некоторый способ локального усреднения данных, при котором несистематические компоненты взаимно погашают друг друга.

Следующий шаг состоит в оценивании параметров модели, для чего используются процедуры минимизации функции потерь. Полученные оценки параметров используются на последнем этапе (прогноз) для того, чтобы вычислить новые значения ряда и построить доверительный интервал для прогноза.

Для решения поставленной задачи были выбраны нейросетевые алгоритмы прогнозирования, поскольку они наиболее привлекательны с точки зрения их адаптивности к новым условиям и способности к обобщению полученной информации (обучаемости на примерах) [1–2]. Для нейронных сетей на первом этапе следует выбрать следующее:

- какие нейроны мы хотим использовать (число входов, передаточные функции);
- каким образом следует соединить их между собой;
- что взять в качестве входов и выходов сети.

На втором этапе нам следует «обучить» выбранную сеть, т.е. подобрать такие значения ее весов, чтобы сеть работала нужным образом.

Важно отметить, что вся информация, которую сеть имеет о задаче, содержится в наборе примеров. Поэтому качество обучения сети напрямую зависит от количества примеров в обучающей выборке, а также от того, насколько полно эти примеры описывают данную задачу. Так, например, бессмысленно использовать сеть для предсказания финансового кризиса, если в обучающей выборке кризисов не представлено. Считается, что для полноценной тренировки требуется хотя бы несколько десятков (а лучше сотен) примеров.

Математически процесс обучения можно описать следующим образом. В процессе функционирования нейронная сеть формирует вы-

ходной сигнал Y в соответствии с входным сигналом X , реализуя некоторую функцию $Y = G(X)$. Если архитектура сети задана, то вид функции G определяется значениями синаптических весов и смещений сети. Обучение состоит в поиске (синтезе) функции G , близкой к F в смысле некоторой функции ошибки E .

Если выбраны множество обучающих примеров-пар и способ вычисления функции ошибки E , то обучение нейронной сети превращается в задачу многомерной оптимизации, имеющую очень большую размерность, при этом, поскольку функция E может иметь произвольный вид, обучение в общем случае — многоэкстремальная невыпуклая задача оптимизации [4].

При прогнозировании предполагается, что значение прогнозируемой величины зависит от каких-либо факторов, назовем их определяющими факторами, или признаками. Один из подходов к задаче прогнозирования основан на предположении зависимости прогнозируемых от предыдущих значений временного ряда. Теоретическим обоснованием такого подхода является теорема Такенса:

Если временной ряд порождается динамической системой, т.е. значения $\{A(t)\}$ есть произвольная функция состояния такой системы, существует такое число d (примерно равное эффективному числу степеней свободы данной динамической системы), что d предыдущих значений временного ряда однозначно определяют следующее значение [3].

В качестве временных рядов были выбраны колебания курсов валют.

Результаты моделирования и прогнозирования (рис.1) с помощью однослойной линейной нейронной сети (a linear neuron network) представляют собой ни что иное, как сглаживание методом наименьших квадратов, взвешенных относительно расстояния.

Осуществляется локальное усреднение данных, при котором несистематические компоненты взаимно погашают друг друга; отфильтровывается шум; данные преобразуются в относительно гладкую кривую, представляющую собой тренд.

Прогноз линейной сетью дает только информацию о возможной тенденции, и мы не можем получить реальных значений временного ряда.

Отметим, что теоретической основой для построения нейронных сетей является следующее утверждение:

Для любого множества пар входных-выходных векторов произвольной размерности $\{(X^k, Y^k), k = 1..N\}$ существует однородная двухслойная нейронная сеть с последовательными связями, с сигмоидальными передаточными функциями и с конечным числом нейронов, которая для каждого входного вектора X^k формирует соответствующий ему выходной вектор Y^k .

Таким образом, для представления многомерных функций многих переменных может быть использована однородная нейронная сеть, имеющая всего один скрытый слой, с сигмоидальными передаточными функциями нейронов. В качестве такой сети была выбрана нейронная сеть с прямым распространением сигнала и обратным распространением ошибки (a feed-forward backpropagation network).

На практике наиболее оптимальным оказалось 10–15 нейронов в скрытом слое и один нейрон в выходном слое. Данная сеть очень точно аппроксимирует существующую нелинейную зависимость. Ошибка прогноза составила $10e-4$, что является удовлетворительным показателем для данной задачи, с данным типом нейронной сети (рис.2). Больше количество нейронов (больше 30) в скрытом слое давало такие же результаты аппроксимации при значительном увеличении времени вычислений, при этом качество прогноза ухудшалось, что вызвано явлением переобучения.

В заключении можно сделать следующие выводы:

1. Однослойные линейные сети могут решать задачи линейной аппроксимации функций. Возможна аппроксимация нелинейной зависимости в рамках линейной структуры сети. Причем находится наиболее близкое решение в смысле минимума среднеквадратичной ошибки.

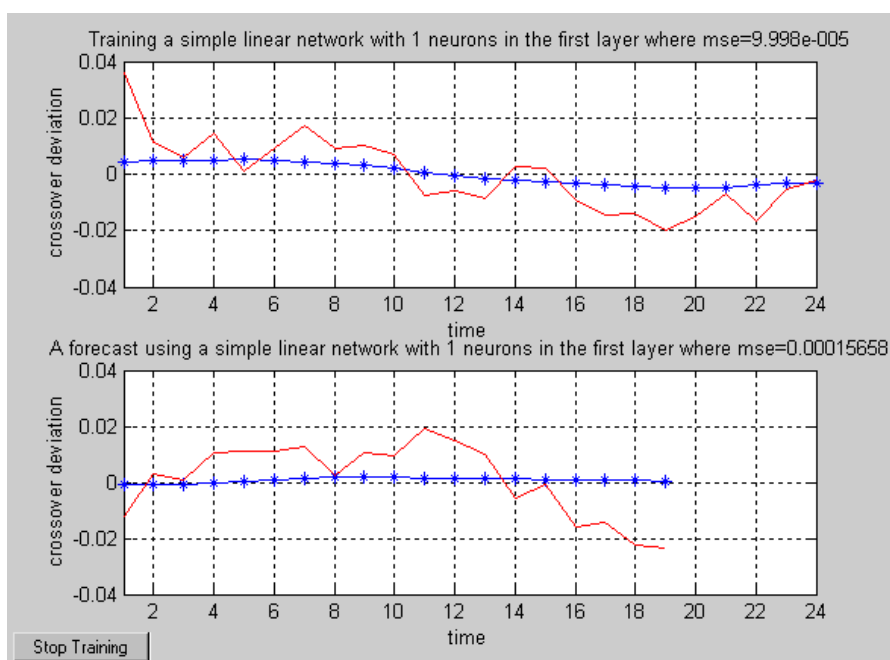


Рис.1. Результаты моделирования (сверху) и прогнозирования временного ряда (снизу)

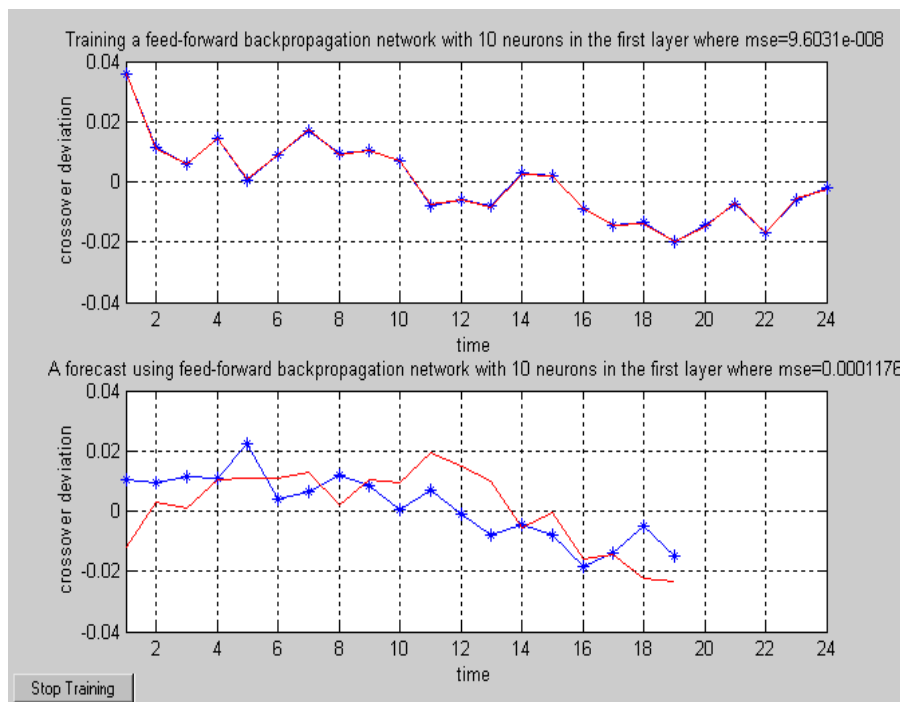


Рис.2. Результаты моделирования (сверху) и прогнозирования временного ряда (снизу)

2. Сеть с прямой передачей сигнала и обратным распространением ошибки может воспроизводить сложные нелинейные зависимости между входом и выходом. Воспроизведение и прогнозирование временных рядов данными сетями сильно зависит от настройки параметров и количества нейронов. Для данной сети существует удобный способ модифицировать модель по мере того, как появляются новые наблюдения. Модель хорошо работает с временными последовательностями, в которых мал интервал наблюдений, т.е. может быть получена относительно длительная временная последовательность. По этой причине модель может быть использована в областях, где нас интересуют еже часовые, ежедневные или еженедельные наблюдения. Эти модели также используются в ситуациях, когда необходимо анализировать небольшое число временных последовательностей.

Литература

1. Бокс Дж., Дженкинс Г. Анализ временных рядов. Прогноз и управление. Выпуск 1–2. М.: Мир, 1974.
2. Медведев Г. А. Практикум на ЭВМ по анализу временных рядов. Мн.: Университетское, 2001.
3. Крисолов В. А., Чумичкин К. В., Кондратюк А. В. Представление исходных данных в задачах нейросетевого прогнозирования, Одесский национальный политехнический университет. Институт компьютерных систем, 2002-2003.
4. Ежов А. А., Шумский С. А. Нейрокомпьютинг и его применение в экономике и бизнесе. /Под ред. проф. В.В. Харитонова. М.: МИФИ, 1998.